


ISSN 1341-9668
SPring-8 Document
D2014-004

SPring-8

INFORMATION
[利用者情報]

Vol.19 No.1 2014.2




JASRI

SPring-8 Information

目次

CONTENTS

理事長室から - SPring-8 利用研究成果の論文分析 -

Message from President - Bibliometrical Analysis of Research Papers Published by SPring-8 Users -

(公財)高輝度光科学研究センター 理事長
President of JASRI

土肥 義治
DOI Yoshiharu

1

1. 最近の研究から / FROM LATEST RESEARCH

Anomalous Ground State of the Electrons in Nano-confined Water

Department of Chemistry, University of Michigan
Physics Department, University of Houston
Research & Utilization Division, JASRI

Aniruddha Deb
George F. Reiter
Yoshiharu Sakurai
Masayoshi Itou

Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of Tennessee

Veena G. Krishnan
Stephen J. Paddison

2

長期利用課題報告 1

ナノドット相変化材料のピコ秒レーザー誘起結晶化観察 - 次世代光ストレージ開発を目指して -

Long-term Proposal Report 1: Picosecond Laser-Induced Crystallization of Nanodot Phase-Change Material

- toward development of next generation optical storage -

京都大学 大学院工学研究科
Department of Materials, Science & Engineering, Kyoto University

山田 昇
YAMADA Noboru

7

Long-term Proposal Report 2: Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) of Iron-Based Enzymes for Hydrogen Metabolism, Nitrogen Fixation, Small Molecule Sensing, DNA Repair, Photosynthesis, and Iron Storage

Department of Chemistry, University of California - Davis /
Physical Biosciences Division, Lawrence Berkeley Laboratory

Stephen P. Cramer
Hongxin Wang

Department of Biochemistry, Virginia Polytechnic Institute

Christie Dapper
William E. Newton

Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion

Hideaki Ogata
Wolfgang Lubitz

Department of Chemical Engineering, Stanford University

Jon M. Kuchenreuther
James R. Swartz

School of Chemistry, University of East Anglia

Nick LeBrun

Research & Utilization Division, JASRI

Yoshitaka Yoda

12

2. SACLA 通信 / SACLA COMMUNICATIONS

SACLA における 2 色レーザー発振

Two-color XFEL Operation at SACLA

(独)理化学研究所 放射光科学総合研究センター XFEL 研究開発部門
XFEL Research and Development Division, RIKEN

原 徹
HARA Toru

18

SACLA のイメージングデータ解析の現状

Current Status of Development of CDI and SFX at SACLA

(公財)高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室
XFEL Utilization Division, JASRI

城地 保昌
JOTI Yasumasa

22

3. 研究会等報告 / WORKSHOP AND COMMITTEE REPORT

International Conference on Biology and Synchrotron Radiation (BSR2013) 会議報告

Report on the International Conference on Biology and Synchrotron Radiation (BSR2013)

(公財)高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門
Research & Utilization Division, JASRI

長谷川 和也
HASEGAWA Kazuya

星野 真人
HOSHINO Masato

27

14th International Conference on Accelerator and

Large Experimental Physics Control Systems (ICALEPCS2013) 報告

Report on the 14th International Conference on Accelerator and Large Experimental Physics Control Systems

(公財)高輝度光科学研究センター 制御・情報部門
Controls and Computing Division, JASRI

山下 明広
YAMASHITA Akihiro

33

第 6 回 SPring-8 萌芽的研究アワード / 萌芽的研究支援ワークショップ報告

The 6th Workshop on the SPring-8 Budding Researchers Support Program / Winners of Budding Researchers Award

SPring-8 萌芽的研究アワード審査委員会 委員長
Chair of The SPring-8 Budding Researchers Award Committee

高田 昌樹
TAKATA Masaki

37

4. SPring-8 通信 / SPring-8 COMMUNICATIONS		
2012A 期 採択長期利用課題の中間評価について Interim Review Results of 2012A Long-term Proposals	(公財)高輝度光科学研究センター 利用業務部 User Administration Division, JASRI	40
2010A 期 採択長期利用課題の事後評価について Post-Project Review of Long-term Proposals Starting in 2010A	(公財)高輝度光科学研究センター 利用業務部 User Administration Division, JASRI	42
2010B 期 採択長期利用課題の事後評価について Post-Project Review of Long-term Proposals Starting in 2010B	(公財)高輝度光科学研究センター 利用業務部 User Administration Division, JASRI	44
SPring-8 運転・利用状況 SPring-8 Operational Status	(公財)高輝度光科学研究センター 研究調整部 Research Coordination Division, JASRI	46
論文発表の現状 Statistics on Publications Resulting from Work at SPring-8	(公財)高輝度光科学研究センター 利用業務部 User Administration Division, JASRI	48
最近 SPring-8 もしくは SACLA から発表された成果リスト List of Recent Publications	(公財)高輝度光科学研究センター 利用業務部 User Administration Division, JASRI	52
SPring-8 利用研究成果の論文分析 2013 一年間論文数と論文被引用状況 Statistical Analysis on Publications and Citations at SPring-8 2013	(公財)高輝度光科学研究センター 利用業務部 User Administration Division, JASRI	74
5. 談話室・ユーザー便り / USER LOUNGE・LETTERS FROM SPring-8 USERS		
SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 活動報告 SPRUC Activity Reports	SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 庶務幹事 / (独)理化学研究所 放射光科学総合研究センター RIKEN SPring-8 Center, RIKEN	西堀 英治 NISHIBORI Eiji
6. 告知板 / ANNOUNCEMENT		
「専用ビームライン 中間評価」について Interim Review Results of Contract Beamlines	(公財)高輝度光科学研究センター 利用業務部 User Administration Division, JASRI	80
SPring-8 コンファレンス 2014 ～最先端光サイエンスの世界～ SPring-8 Conference 2014 ~ The World of Advanced Photon Science ~		87
第 22 回 SPring-8 施設公開のご案内 Announcement of SPring-8 Open House		88
第 14 回 SPring-8 夏の学校 開催のご案内 ー最先端の放射光科学を学ぶー SPring-8 Summer School 2014		89

SPring-8 利用研究成果の論文分析

公益財団法人高輝度光科学研究センター
理事長 土肥 義治



大型放射光施設 SPring-8 は、1997年の供用開始から16年が経過し、多様なビームライン (BL) の整備と各種機器の高度化により世界最高レベルの先端研究基盤となり、学術の進歩と産業の発展に貢献してきた。現在、稼働している BL 数は、共用 BL26本、専

用 BL19本、理研 BL9本、加速器診断 BL2本の総計56本であり、さらに1本が調整中である。これらの BL を利用して15年間に8,000編近い論文が発表された。最近は年間800編近い論文が発表されており、この値は我が国から一年間に発表される総論文数の1%強である。また、これまでに発表された全論文の被引用数の平均値は、1編あたり16回程度と高い値を示している。このように、SPring-8の利用研究成果の主要なアウトプットである論文は量と質ともに高く、我が国の学術の進歩に貢献してきた。しかしながら、研究基盤 SPring-8のさらなる進展のためには、これらの発表論文データの分析や国際的なベンチマーキングによって強みと課題を把握する必要がある。

さて、研究者が研究を推進する動機は、学理の追求と現実の問題解決とに大別できる。学理を追求する純粋基礎研究をボーア型研究、二つを同時追求する目的基礎研究をパスツール型研究、そして応用開発研究をエジソン型研究と称しよう。被引用数上位1%の論文を産出した日米の研究者を対象とした最近の調査によれば、ボーア型研究の割合は、日本45%、米国46%と最大を占めた。パスツール型研究の割合は、米国33%そして日本15%であり、一方、エジソン型研究は、日本15%そして米国11%であった。このように、現実の問題解決を目指す研究も、高被引用度論文を生み出していることは注目してよい。最近、我が国の研究活動の活性化のためには、研究論文の量的拡大と質の向上に加えて、新興・融合領域研究やハイリスク研究を促進すべきと提言されている。新規性の高い研究やハイリスク研究は、成功すれば成果が学術的あるいは社会的・経

済的に大きなアウトカムやインパクトを生み出す。したがって、被引用数の高い論文を多く産出すればそれによしとする一面的な見方ではなく、複眼的に研究論文の分析と議論を進める必要があることは言うまでもない。

読者の方々のご参考のために、本誌^{*1}の記事に SPring-8利用研究者の発表論文の年間総数に加えて、論文の被引用数のデータが共用 BL、専用 BL、そして理研 BL について掲載してある。他機関とのベンチマークによく使用される最近11年間 (2002-2012) の累積論文数、累積被引用数、平均被引用数が示してあるが、論文の平均被引用数は14.4であり、この値は東京大学や京都大学とほぼ同等である。論文の影響が被引用数に表れ、その影響度を測定できるのは発表後2年目以降と言われている。本誌においても最近の状況を知るために、2年経過した2011年発表論文のデータが示してある。平均被引用数は、2011年の4.9から2002年の32.7まで年の経過とともに増大している。このことは、影響度の大きい論文が多数発表されていることを示唆している。ご参考のために、2011年に発表された論文のなかの被引用数トップ10の論文が示してある。最近では共用 BL26本を用いて年間約1,400課題の実験が実施されているが、2011年の発表論文数は約570編である。このことは、2.5課題で1編の論文が発表されたことになる。1課題で論文1編が出るよう実験シフト数を配分できればと思う。

ここで注目していただきたいのは、BL別の論文数と被引用数である。11年間の累積論文数と累積被引用数において、また2011年においても最も高い実績値を示すトップ3の共用ビームラインは、BL01B1 (XAFS)、BL02B2 (粉末結晶構造解析) および BL41XU (構造生物学 I) である。BL3本の総論文数は、共用 BL26本の全数の30%近くを占めている。また、BL3本の総被引用数は、共用 BLの全数の50%以上を占めているのである。これらの論文分析データを BLの高度化や改廃のための議論に生かしていただきたい。BLの多様性を確保しつつ共用施設の利用効率を最大化するためにも、論文分析の結果を毎年公表して説明責任を果たしていきたいと考えている。

^{*1} <http://user.spring8.or.jp/sp8info/?p=24399> 「SPring-8 利用研究成果の論文分析 2013」参照

Anomalous ground state of the electrons in nano-confined water

Aniruddha Deb^{1*}, George F. Reiter², Yoshiharu Sakurai³, Masayoshi Itou³,
Veena G. Krishnan⁴, Stephen J. Paddison⁴

¹Department of Chemistry, University of Michigan, Ann Arbor, USA

²Physics Department, University of Houston, Houston, USA

³Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI)/SPring-8, Sayo-Cho, Hyogo, Japan

⁴Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of Tennessee, Knoxville, USA

Abstract

Water under nano-confinement is known to exhibit different properties from that of bulk water. Recent neutron scattering investigations showed that the proton momentum distribution is qualitatively different from that of the bulk water for water confined on a scale of 20 Å. Since the confining potential for the protons is due to the electrons, the electronic ground state of nano-confined water should also be anomalous. X-ray Compton scattering, which probes the ground state of a system, was utilized to understand the ground state configuration of the valence electrons of a particular nano-confined water system, Nafion, a proton exchange membrane (PEM) used in fuel cells. The results showed, for the first time, that the electrons are in a different quantum state from that of bulk water. This difference cannot be explained by empirical models based on weakly interacting molecules. The separation of elements of biological cells is about 20 Å, therefore we would expect the functioning of the cells to be determined by the properties of this nano-confined state.

1. Introduction

Nano-confined water, confined on a scale of 20 Å, is known to exhibit equilibrium and dynamical properties that are different from that of bulk water^[1]. These properties have been theoretically interpreted primarily on the basis of empirical models of water, which assume a model of weakly interacting molecules. Previous investigations have shown that this model is inadequate to describe the proton momentum distribution in water confined in carbon nanotubes, xerogel, and Nafion^[2]. Indeed, it is even quantitatively unable to explain the momentum distribution in bulk water at standard temperature and pressure (STP)^[3]. These earlier investigations have suggested that the properties of the hydrogen bond network are responsible for the differences, where the electronic overlap between acceptor oxygens and donor protons in the hydrogen bond is sufficiently strong that the network as a whole can

respond in ways that are not possible for a collection of molecules interacting weakly electrostatically. Beyond our theoretical speculations, however, the fact that the momentum distributions in the confined systems are so different from those of bulk water means that the part of the many-body Born-Oppenheimer surface sampled by the protons that lead to these momentum distributions must be qualitatively different from that of a proton in a covalent bond, weakly interacting electrostatically with an acceptor oxygen. Hence, the spatial distribution of valence electrons in the hydrogen bond network in nano-confined water system would also be qualitatively different from that of bulk water.

These changes in the spatial distribution of valence electrons of bulk water will be reflected in the momentum distribution of the electrons, and can be directly observed utilizing x-ray Compton scattering, an inelastic x-ray scattering process at large energy and momentum

* To whom Correspondence should be addressed: debani@umich.edu

transfers, probing the electronic ground state of the target system. We show here that these predicted changes can indeed be observed, though it is not possible to relate the measured electron momentum distribution differences directly to Born-Oppenheimer potentials, as was done for the proton momentum distribution^[4]. We observe that the differences are much larger than those produced by disordering the hydrogen bond of a pair of water molecules, as happens as water is heated. The difference in bond disorder between water confined in Nafion, and bulk water, is seventeen times larger than the difference between bulk water just above the freezing point, and bulk water just below the boiling point, the latter being a difference easily measured with x-ray Compton scattering. We conclude that this change of the electron momentum distribution observed is not possible within the model of weakly interacting molecules, and requires the redistribution of electrons through the hydrogen bond network. With this approach, we also present here reinterpretation of fluorescence^[5] and pump probe experiments^[6] performed earlier by others, to support this conclusion.

2. Experimental Methods

We restrict our discussion here to water confined in two types of Nafion, Nafion 1120 and Dow 858, where Nafion is a perfluorosulfonic acid membrane. These are the same samples as those used in the neutron Compton scattering measurements, in order to eliminate sample variability^[7]. These are ionomers with hydrophobic poly-

(tetra-fluoroethylene) (PTFE) backbones and randomly pendant perfluoroether side chains terminating with sulfonic acids. The ionomers when hydrated exhibits a nano-phase separated morphology where the water and ions exist in domains which are only a few nanometers in diameter surrounded by the backbones^[8, 9] (Fig. 1). The sulfonic acid group (-SO₃H) donates protons to the water, when there is sufficient water, making them very good proton conductors, and hence popularly used as the electrolyte in commercial fuel cells. The samples prepared were cleaned in nitric acid, and loaded with water by equilibration with vapor of a LiCl salt solution, of known concentration for two weeks. The concentration of water relative to the number of sulfonyl groups, λ , was 14, same as it was in the neutron experiments. The samples used were first sealed in the x-ray sample cells while in contact with the vapor to avoid any loss of water in the atmosphere. The samples were carefully monitored, by weighing them before and after the measurements, which showed no significant weight change. A dry sample was prepared by leaving the sample in vacuum for five days at room temperature. To estimate the true background contribution, measurement of the dry sample (Fig. 2) was performed as background before filling the samples with water. The signal from the dry Nafion (for both Nafion 1120 and DOW 858) was subtracted from that of the hydrated sample to obtain the signal for the confined water. The experiments were performed at the BL08W, high energy inelastic scattering beam line at SPring-8. The measurements were performed at an incident energy of 182 keV, at a scattering angle of 178.3° and the scattered photons were collected utilizing a ten-element Ge solid-state detector. For the measurement, the samples were confined in an Al sample-holder of 3 mm thick, with Kapton windows (~10 μm thick) used as the x-ray window and the sample was placed in a vacuum chamber to minimize the background due to scattering from air. All the measurements were performed at room temperature and as large statistics are necessary to observe the small changes between the confined and the bulk water, the data were constantly monitored by checking for consistency, for variation larger than the statistical accuracy, after every 12 minutes. For good statistics, the total counts in each raw Compton profile (CP), under the Compton peak was

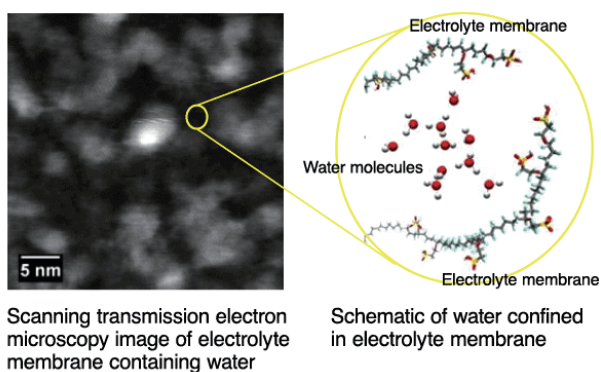


Figure 1: Scanning transmission electron microscopy (STEM) image of the wet Nafion 1120 containing water. The schematic on the right shows how the water is nano-confined in the backbone of the Nafion 1120 PEM.

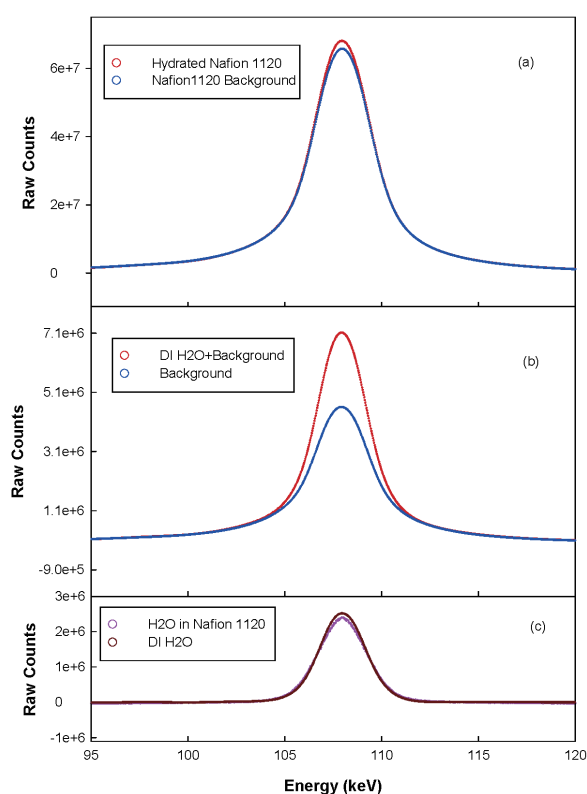


Figure 2: Comparison of CP of (a) Hydrated Nafion 1120 (red), and background from dry Nafion 1120 (blue); (b) DI water with background (red) and background only (blue); (c) water in Nafion 1120, obtained from subtracting the CP of background from CP of hydrated Nafion 1120 (pink), DI water, obtained from subtracting the CP of background from CP of DI water with background (dark red).

more than 1×10^9 counts. The measured CP's were then corrected for the necessary energy dependent corrections, absorption, detector efficiency, and multiple scattering, before converting to the momentum scale utilizing the relativistic cross-section correction. The CP's were then binned at steps of 0.1 a.u. and the positive and the negative momentum sides were folded to increase the statistical accuracy. As a part of the comparison with the bulk water, we also performed measurements of a sample in the same sample holder containing bulk deionized (DI) water (Fig. 2), measured under the same experimental conditions.

For the data analysis, the valence-electron CP's of both the confined and bulk samples were obtained by subtracting the theoretical core electron profile

contribution from the experimental profiles. The theoretical core-profile contribution was taken based on the free-atom Hartree-Fock simulations^[10], where we have treated oxygen ($1s$)² as the core electrons, and finally as we are comparing the subtle shape changes of the CP between the bulk and the nano-confined water, the CP's were carefully again renormalized to 8 valence electrons, for proper comparison. The bulk water profile was in good agreement with an earlier theoretical model^[11] and is shown in the inset of Fig. 3.

3. Results and Discussions

The CP's for the two Nafion samples and bulk water are shown in the inset of Fig. 3, and as a comparison of all the results, the subtracted profile for the two Nafion samples from bulk water, has been compared with a calculation by Nygård et. al.^[12] of the difference between the CP's of H₂O and D₂O. The comparison uses a dimer approximation with the distribution of angles and bond lengths in bulk water inferred from NMR measurements. In this calculation, it was assumed that all the reordering of the electron distribution is due to changes in the configuration of the hydrogen bond between a single donor and single acceptor water molecule. It is important to note here, that this approximation has been used to satisfactorily fit a series of experimental CP's for bulk water between temperatures 5°C and 90°C^[13].

As is seen clearly from our experimental results (Fig. 3), this previous theoretical model used for explaining the changes in bulk water is inadequate. The maximum amplitude of $[\Delta J(0)/J(0)]$, the fractional change in the CP at zero momentum ($q=0$), for confined water is 0.05. The maximum difference in $[\Delta J(0)/J(0)]$ between water at 5°C and 90°C is only 0.003 ^[13]. With this direct comparison, where we consider the change is the measure of the disorder of the hydrogen bond network, the disordering of the hydrogen bond network due to the confinement is 17 times that produced by the thermal disordering in going from just above freezing to just below boiling, and 46 times the difference between H₂O and D₂O at comparable temperatures. This is not entirely unexpected, as the proton momentum distribution for the two Nafion samples compared to that of water oscillations are indicative of the proton being coherently distributed in a double well with a separation of the wells on the order of 0.3 \AA ^[12]. The

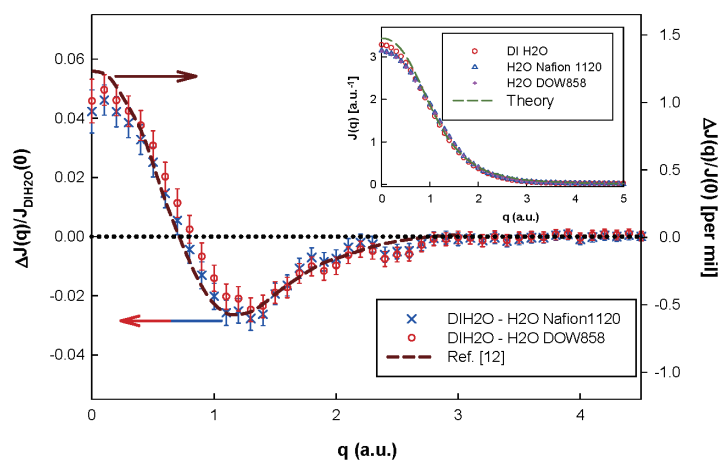


Figure 3: The difference CP of Nafion 1120 and Dow 858 subtracted from the CP of bulk water. The red dashed line^[12] is a fit to the difference (H₂O-D₂O) between H₂O and D₂O, rescaled to fit our data; a rescaling by a factor of 46 is needed. The inset shows the experimental CP for DI water, confined water in two types of Nafion (Nafion 1120 and DOW 858) and a previously reported^[11] theoretical CP (green dashed line) of isolated water molecule.

kinetic energy has gone up because each of these wells is more tightly binding the proton than the covalent bond of the isolated water molecule. The kinetic energy is 245 meV and 268 meV for the Nafion and Dow samples respectively, compared to 148 meV for bulk water at room temperature. The change in kinetic energy in going from 5°C to 90°C for bulk waters is only 0.5 meV.

The direction of the change for the electron CP is consistent with the tighter binding of the proton, which we would expect to require a greater localization of the valence electrons in the vicinity of the proton, and hence a broader CP, as observed. It is conceivable that the changes we are seeing here are the result of changes in the electron distribution in the ionomer due to the morphological changes that occur as the water swells the dry Nafion. We think this is unlikely, since the C-F bonds that describe the ionomer (Teflon) are unlikely to be affected significantly by the physical displacements of the ionomer or by interaction with the water molecules. Furthermore, the two different samples used here have different morphologies, due to the difference in the size of the side chains containing the sulfonyl groups. They

yield, nevertheless, very similar subtracted CP's (between the confined water in Nafion and bulk water), within the error bars.

It might also be thought that the presence of the extra proton, donated by the sulfonyl groups (and responsible for the high conductivity of Nafion) is changing the electron distribution in its vicinity sufficiently to make up the large difference in the subtracted profile. Beyond the fact that there is only 1 proton in 28 which is free, we have the evidence of experiments and calculations on LiCl, which is known to strongly disorder the hydrogen bond network, that the changes of $(1/2) [\Delta J(0)/J(0)]$, from bulk water at similar concentrations of Li⁺, are of the order of 0.005. The lack of a dramatic effect in the electron Compton scattering is mirrored in the neutron Compton scattering, where only small deviations of the momentum distribution from that of bulk water are seen at these concentrations^[14]. Hence we conclude that

the quantum ground state of the electron-proton system when the hydrogen bond network is disordered by nanoconfinement is qualitatively different from the ground state of a weakly interacting collection of molecules.

Some further support for our explanation comes from excited state proton transfer measurements of a fluorescent molecule, 8-hydroxypyrene-1,3,6-trisulfonate (HPTS), utilized as a probe for the proton dynamics^[15]. The molecule tends to stay in the middle of the water filled regions in the Nafion. The electronic state is excited by a laser pulse, which leads to the proton in the OH group of the molecule being ionized. The recombination time depends on the transport processes affecting the now free proton. Assuming a diffusion process for that transport leads to a $t^{-1.5}$ dependence of the rate of recombination for long recombination times. This is what has been observed in bulk water, while in Nafion the observed rate is $t^{0.8}$. Evidently, the transport of the proton is not a diffusion process, it would be a diffusion process for long times as long as the "jumps" of the proton from one location to another are determined by the local conditions in the vicinity of the proton as it

moves from one equivalent position to another, and there is no memory of where the proton came from on the next jump. One or both of these conditions must be violated in the transport of protons in Nafion. The Grothuis mechanism, in which the proton that is moving changes identity, but otherwise moves from site to site between the water molecules, does lead to a diffusion process. The slowing down of the transport of the protons that have been photo excited in the confined water cannot be due to the protons reflected off the surroundings, as these would only speed up the recombination of the HPTS ion with the dissociated protons. To change the exponent requires some collective response of the hydrogen bond electron-proton network to the motion of the proton. That this response is a property of confined water, and not some peculiarity of Nafion is demonstrated by the fact that the same behavior is seen in reverse micelles of comparable size to the pores of Nafion^[15].

Direct confirmation that the electronic state in nano-confined water differs significantly from that in bulk water is also found in pump-probe experiments in which the excitation of the HPTS is observed to decay on a rapid time scale, due to direct de-excitation of the electronic state without the return of the ionized proton^[6], which does not happen in bulk water.

The characteristic scale at which the nano-confined ground state appears is 20 Å, the scale of the distance between elements of biological cells. It would be remarkable if evolution had such a state available and didn't use it. We expect the quantum properties of this state have a profound effect on the functioning of cells.

Acknowledgements

G. Reiter's work was supported by the DOE, Office of Basic Energy Sciences under Contract No. DE-FG02-08ER46486. G. Reiter and Aniruddha Deb would like to thank Phil Platzman, now deceased, for many rewarding conversations and the inspiration to look at x-ray Compton scattering for a signature of the new quantum state. S. Paddison acknowledges support by the U.S. Army Research Office under Contract Number W911NF-07-1-0085. These experiments were performed with approval of the Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI)/SPring-8, Proposal No. 2011A1074.

References

- [1] W. H. Thompson, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **62**, 599 (2011).
- [2] G. Reiter, A. Kolesnikov, S. Paddison, P. Platzman, A. Moravsky, M. Adams and J. Mayers, *Physical Review B* **85**, 045403 (2012).
- [3] C. J. Burnham, T. Hayashi, R. L. Napoleon, T. Keyes, S. Mukamel and G. Reiter, *J. Chem. Phys.* **135**, 144502 (2011).
- [4] D. Homouz, G. Reiter, J. Eckert, J. Mayers and R. Blinc, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 115502 (2007).
- [5] D. E. Moilanen, D. B. Spry and M. D. Fayer, *Langmuir* **24**, 3690 (2008).
- [6] K. J. Tielrooij, M. J. Cox and H. J. Bakke, *CPPC* **10**, 249 (2009).
- [7] K. D. Kreuer, M. Schuster, B. Obliers, O. Diat, U. Traub, A. Fuchs, U. Klock, S. Paddison and J. Maier, *Journal of Power Sources* **178**, 499 (2008).
- [8] D. Wu, S. J. Paddison and J. A. Elliott, *Macromolecules* **42**, 3358 (2009).
- [9] D. Wu, S. J. Paddison and J. A. Elliott, *Energy Environ. Sci.* **1**, 284 (2008).
- [10] F. Biggs, L. B. Mendelsohn and J. B. Mann, *At. Data Nucl. Data Tables* **16**, 201 (1975).
- [11] C. Bellin, B. Barbiellini, S. Klotz, T. Buslaps, G. Rousse, T. Strassle and A. Shukla, *Physical Review B* **83**, 094117 (2011).
- [12] K. Nygård, M. Hakala, T. Pylkkänen, S. Manninen, T. Buslaps, M. Itou, A. Andrejczuk, Y. Sakurai, M. Odelius and K. Hämäläinen, *J. Chem. Phys.* **126**, 154508 (2007).
- [13] M. Hakala, K. Nygård, S. Manninen, S. Huotari, T. Buslaps, A. Nilsson, L. G. M. Pettersson and K. Hämäläinen, *J. Chem. Phys.* **125**, 084504 (2006).
- [14] G. Reiter, J. Mayers and T. Abdul-Redah, *Physica B* **385-386**, 234 (2006).
- [15] D. B. Spry, A. Goun, K. Glusac, D. E. Moilanen and M. D. Fayer, *JACS* **129**, 8123 (2007).

長期利用課題報告 1

ナノドット相変化材料のピコ秒レーザー誘起結晶化観察 —一次世代光ストレージ開発を目指して—

京都大学 大学院工学研究所
山田 昇

Abstract

「プラズモニック近接場光」を記録再生光源、「ナノドット相変化材料」をメモリ層とする次世代の高速・高密度光記録を目指して、相変化材料 $\text{Ge}_{10}\text{Sb}_{90}$ のナノドットアレイを作製し、そのレーザー誘起結晶化過程を観測した。ビームライン BL40XU のポンププローブ法による時分割 X 線回折 (XRD) と反射率変化測定の結果、直径・高さ 50 nm の $\text{Ge}_{10}\text{Sb}_{90}$ アモルファスナノドットは、300 ピコ秒の近赤外レーザー照射に誘起されて結晶化し反射率増大を示すことが確認され、また、励起→結晶化の遅延時間は層構成の工夫により 15~20 ns まで短縮された。これらの結果は、相変化ナノドットが、高密度・高速次世代光記録に適用可能なポテンシャルを有することを示す。

1. はじめに

DVD やブルーレイディスク等の書換型光ディスクは、家庭用ビデオ録画機等のキーデバイスとして広く普及している。その心臓部となるメモリ層には、 GeSbTe 三元合金薄膜^[1] や AgInSbTe 等の Sb ベース合金薄膜^[2] 等、一般に相変化材料と呼ばれる材料層が用いられており、レーザー誘起で結晶相→アモルファス相間の可逆構造変化を瞬時に生じ、大きな光学特性変化を呈する^[3]。光ディスクメディアは安価、長期保存性が高い、保存に要するエネルギーが小さい等の利点を持つことから、爆発的に増大を続けるデジタルデータの受け皿となる、いわゆる理想的なグリーンアーカイブとしての期待も大きい。

将来メモリに向けて課題となるのは、当然、記録容量(密度)と記録速度である。近年、光ディスクにおける密度および速度向上は停滞気味であるが、これは、記録再生に用いるレーザービームを今以上に細く絞ることが限界に近いことによる。メモリ薄膜を「紙」に、レーザービームを「ペン」に見立てると、これまで、ペン先を可能な限り細く尖らすことで、より小さな字を書いてきたけれど、もうこれ以上は細く削れないという状態である。

100 GB 容量(3層)のブルーレイディスクの場合、波長 λ : 405 nm の半導体レーザーと開口数 NA : 0.85 の対物レンズを用いて ϕ 0.11 μm までの微小マークを記録している^[4]。より密度を上げるには λ /

NA 値を小さくすればいいのだが、従来光学系では NA の上限は 1 であり限界に近い。また、 λ を紫外域へと単純にシフトしても、樹脂やレンズ等、周辺部品への制約は格段に高くなる上に、期待できる密度向上は高々数倍程度と飛躍的な改善は期待できない。

しかしながら、この課題は記録光源(ファーフールド光)に関わる問題であり、けっして記録材料的な限界に関わるものではない。そこで、ニアフィールド(近接場)の適用が様々に検討されてきた^[5-7]。なかでも、プラズモニックな近接場を用いる方法は、数 nm~数 10 nm 径と、従来の限界をはるかに超える超細の「ペン」が得られ画期的な高密度達成のポテンシャルを有する^[8]。さらに、記録材料を従来の薄膜から互いに孤立したナノドットアレイ化とすることで、近接場光と記録材料の共鳴効果が増大し、より高密度な記録が可能となる^[9-12]。ごく簡略化していえば、せつかく超細の「ペン」を作っても、紙(薄膜)の上ではインクが滲んでしまうが、ナノドットなら滲みが小さくなるというイメージである。

従来、この次世代光ディスク提案では 2 つの開発課題があると考えられた。1 つはナノサイズの「ペン」ならびにナノドットアレイが作れるのかという製法的課題、他の 1 つが相変化材料をナノドット化した際の特性がどうなるのかという材料的課題である。一般に、相変化記録では材料膜が薄くなるほど

アモルファス相が安定化し結晶化能が低下する傾向が知られている。はたしてナノドット化された相変化材料が高速結晶化過程を示すのか、また大きな光学的变化を示すのかが、ナノドット相変化材料が成立するか否かを定めるキーポイントとなる。

かくして、2010年よりの長期研究課題『次世代光ストレージ開発のための相変化微粒子材料のピンポイント構造計測』において、50 nm 級(径、厚とも)の相変化ナノドットアレイを作製し、そのレーザ誘起結晶化過程を時分割 X 線回折 (XRD) および光学的反射率変化として調べることを試みた [13]。

2. 実験方法

2.1 Ge₁₀Sb₉₀ ナノドット試料の作製

実験段階別に2種類のナノドット試料を作製した。1つは、樹脂製ナノピラー群を表面に形成したパターンディスク基板の上に材料層をスパッタする方法である [14]。ターゲット中心とディスク基板中心とを偏芯させることでナノピラー上部のみに膜が堆積され、孤立したナノドットアレイが得られた。この試料は比較的容易に試料準備が可能なので、ポンプ条件を広く調べるために用いた。もう1つは、Si 基板上に形成したスパッタ膜を、電子ビーム描画と反応性エッチングを用いて分割しナノドット化する手法である。作製に時間がかかるが、ナノドット間の完全分離が保証されるので、一連の実験後最適と考えられた層構成で作製した。いずれの場合も、相変化材料には Ge₁₀Sb₉₀ を用いた。アモルファス状態の Ge₁₀Sb₉₀ 層を含む多層構造は市販の光ディスク構成を模擬しており、ポンプ光の吸収効率、光学的变化のエンハンス効果、発生する熱の閉じ込め効果、結晶化促進効果等が考慮されている (図 1)。これまで、同組成の薄膜材料はピコ秒オーダーのレーザ誘起で結晶化することが報告されているが [15]、構造変化を回折強度の変化としてリアルタイムに直接観測した例はない。

2.2 実験システム

XRD 実験には、SPring-8 のビームライン BL40XU に構築したポンプ (近赤外レーザ、波長 800 nm、14 × 74 μm² at FWHM) 一プローブシステム(放射光、

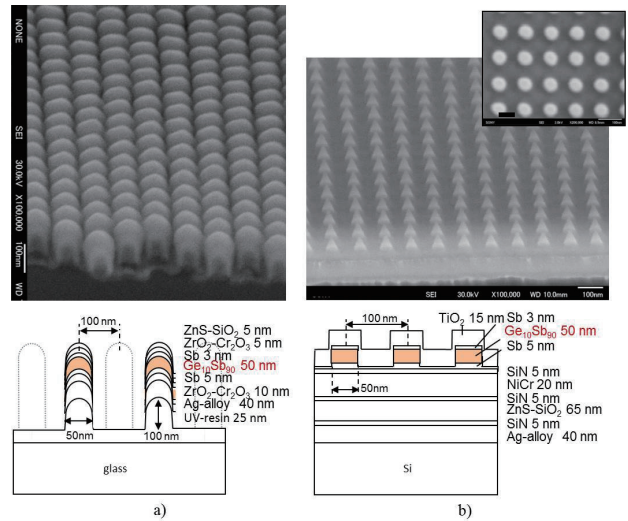


図 1 Ge₁₀Sb₉₀ ナノドット試料の SEM 像と断面の模式図: a) ナノピラー試料、b) EB 加工試料 [13]

波長 0.08266 nm、1.98 × 14.7 μm² at FWHM) を用いた [16]。放射光としては、強度を稼ぐために F 運転モード (1/14-filling + 12 bunches) の filling 部 (バンチトレイン部: 期間 342 ns、周期 948.98 Hz) をセクターで切り出し使用した。検出器を Ge₁₀Sb₉₀ 結晶 (菱面体) の最強回折ピーク (012)_H [17] に合わせ、パルス幅 300 ps の近赤外レーザで励起

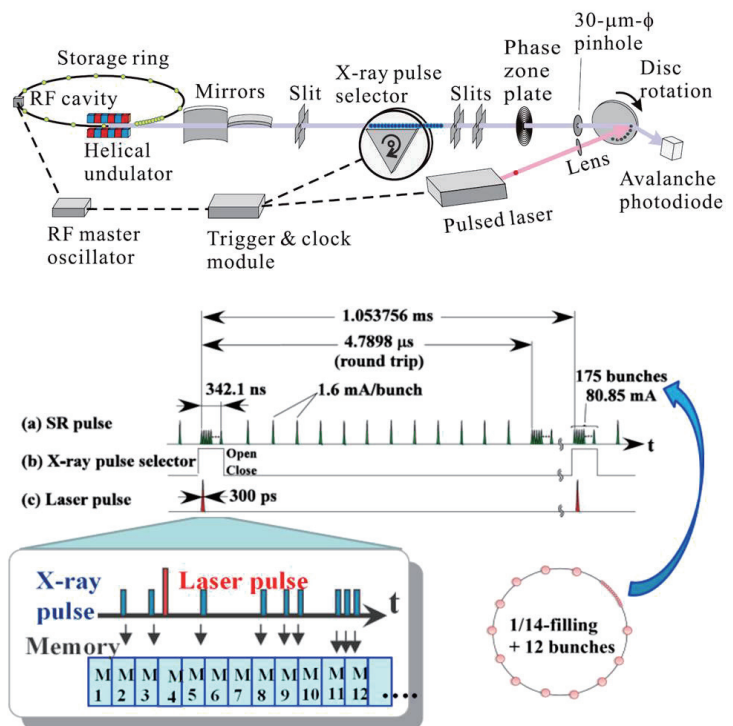


図 2 時分割 XRD 実験のセットアップ: 上図は全体システム、下図はポンププローブのタイムチャート [16]

前後の回折線の強度変化を経過時間に対して1.6 nsの時間ピッチでカウントした。この際、ワンショットでは変化が微小なので、ショットごとに試料を移動させて上記計測を数万回～数十万回、繰り返し、メモリにデータを貯め込んだ^[16](図2)。なお、本実験では単一ナノドットではなくワンショットで複数のナノドット(1200~1300ドット)を一括して観測評価する方法をとった。

3. 実験結果と考察

3.1 時分割 XRD

Ge₁₀Sb₉₀ ナノドット試料の作製時分割 XRD の結果を図3左に示す。各カーブはポンプ光エネルギーを変化した場合に相当し、いずれも約100,000ショットのデータを積算している。S/Bは理想的とはいえないが、明らかにピーク強度の時間的推移が読み取れる。すなわち、300 ps のレーザー照射後、おおよそ70 ns の時間遅れで回折強度が増大し、100~200 ns の時点では飽和している。すなわち、アモルファス状態の Ge₁₀Sb₉₀ ナノドットは、300 ps というごく短パルスのレーザー照射に感応して結

晶化する。但し、X線回折で検出可能な大きな結晶成長が生じるまでには、70 ns 程度の時間遅れがあることがわかった。

3.2 反射率の時間変化

反射率変化は、ポンプ光を近赤外レーザー(波長800 nm、 ϕ 22 μ m at FWHM)を用い、赤色レーザー(波長633 nm、 ϕ 12 μ m at FWHM)をプローブ光として0.8 ns の時間ピッチでリアルタイム観測した(図3右)。反射率変化はXRDとは明らかに異なる現象を示している。ポンピング直後から急上昇し、15 ns 近傍で大きく反転下降するという反射率変化に対応する変化はXRDには見られない。これに対して、70 ns 付近からの反射率増大と150 ns 近傍での飽和現象は、XRD の変化によく対応している。

4. Ge₁₀Sb₉₀ ナノドットの結晶化プロセス

レーザー励起した Ge₁₀Sb₉₀ アモルファス薄膜の反射率変化については、類似した現象がすでに報告されており、反射率の挙動：上昇→減少→再上昇は、

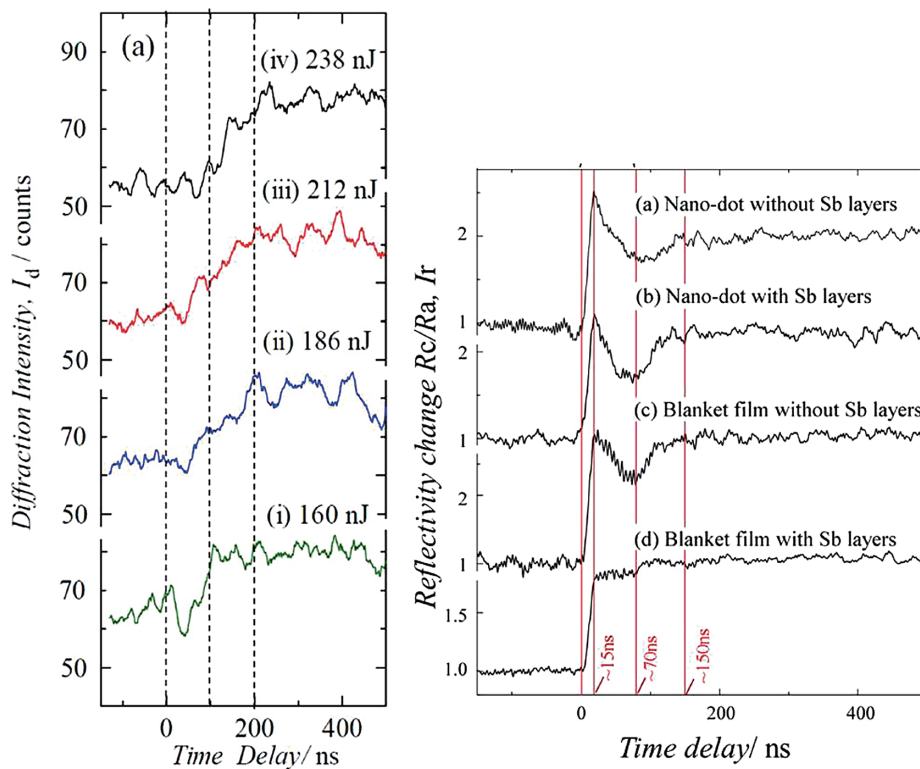


図3 Ge₁₀Sb₉₀アモルファスナノドットのレーザー誘起構造変化(左:時間分解16 ns)および反射率変化(右:時間分解6.4 ns)^[13]

構造変化過程：結晶化→熔融→再結晶化に相当すると示唆されている^[18, 19]。これに、本研究での時分割 XRD 観察の事実を加えることで、Ge₁₀Sb₉₀ ナノドットのレーザー誘起結晶化プロセスは以下のように説明できる。

- (1) レーザ照射により励起部されたナノドット中に、XRD では観測にかからない微細な結晶（あるいは結晶的原子配列）が形成され、その結晶化に伴う発熱により、昇温→結晶化進行→昇温が連続的に進行して、反射率が增大する（0～15 ns；図3右）。
- (2) やがてナノドットの格子温度は融点に到達して溶融し（同図中、(a)～(c)）、反射率は減少に転じる（15～70 ns）。
- (3) 溶融部は周囲環境に熱を放出し冷却され（液相から直接、または一部アモルファス相を介して）再び結晶化する。この時、結晶粒は大きく成長し XRD で検出されるに至る（70～150 ns）。

なお、図3右中の(d)では融解過程を経ず、レーザー照射直後から結晶は成長し続けると解釈される。ちなみに、Sb ベース相変化材料において、Sb 原子の結合組み換えに伴い比較的大きな結晶化潜熱が生じることが報告されている^[20]。

以上の実験結果は、数百ピコ秒のレーザー照射で、ナノドット記録デバイスの記録、消去が可能であることを示す。

5. ナノドット試料構成の最適化（熱拡散抑制）

図3から分かるように液相からの（またはアモルファス相を介しての）再結晶化速度は、励起光のエネルギーならびにデバイスの構成に大きく依存している。たとえば、薄膜ではナノドットよりも反射率回復（再結晶化）が速いこと、同様に Sb シード層の挿入も反射率回復をアシストしていることがわかる。これにより、ナノドット試料の層構成を工夫すれば、薄膜なみの再結晶化速度を得ることが可能であることが予測された。

図4は、記録材料部で生じた熱の逃げを抑制するために光吸収性の低熱伝導率材料層として NiCr 層を挿入したナノドット試料（EB 加工品）での時分割 XRD 結果である。図3右の、最初の反射率上昇に対応するタイミングで（20 ns 付近で）、回折強度が増大していること、すなわち薄膜に劣らない再結晶化速度が実現していることが確かめられた。

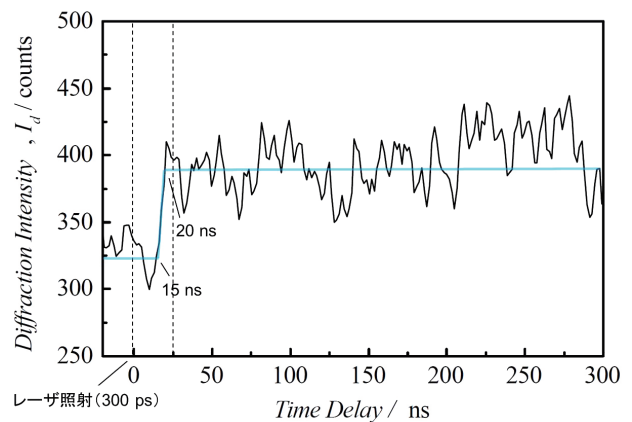


図4 NiCr 蓄熱層を追加挿入した Ge₁₀Sb₉₀ ナノドットの時分割 XRD 観測（時間分解 4.8 ns）^[13]

6. まとめ

ナノドット相変化材料は、光の回折限界（波長限界）に起因する光メモリの記録密度の限界を打破し、理想的なグリーンアーカイブメモリを実現する有力な手段の1つである。今回は、時分割 XRD、反射率変化観測の実験系を構築し、50 nm 級の Ge₁₀Sb₉₀ ナノドットがピコ秒オーダーのレーザー誘起で結晶化することを確認した。次のステップでは、20 nm 以下のより小さいナノドットでの確認、近接場光学系と組み合わせた評価結果が期待される。

謝辞

本報告の成果は、長期利用課題（課題番号 2010A0030～2012B0030）の全期間を通じ、SPring-8 ビームライン BL40XU で得られたものです。課題を推進するうえで、共同研究者としてご尽力いただいた松永利之博士（パナソニック）、川久保伸氏（ソニー）、木村滋博士、福山祥光博士、安田伸広博士、大沢仁志博士（JASRI）、田中義人博士、伊藤基巳紀博士（理研）に厚くお礼を申し上げます。また、貴重な実験試料のご提供、技術支援、ご討議をいただいた児島理恵博士、河原克巳氏、久田和也氏、槌野晶夫氏、三原尚士氏、藤ノ木紀仁氏、（以上、パナソニック）、尾留川正博博士（元パナソニック）、関口浩司氏、藤家彦氏、中沖有克博士（ソニー）、高田昌樹博士（理研）そして各研究機関におけるご関係者の皆様に深く感謝いたします。

参考文献

- [1] N. Yamada: *Phys. Status Solidi B* **249** (2012) 1837-1842.
- [2] H. Iwasaki, Y. Ide, M. Harigaya, Y. Kageyama and I. Fujimura: *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1* **31** (1992) 461-465.
- [3] M. Wuttig and N. Yamada: *Nature Mater.* **6** (2007) 824-832.
- [4] T. Nishihara, A. Tsuchino, Y. Tomekawa, H. Kusada, R. Kojima *et al.*: *Jpn. J. Appl. Phys.* **50** (2011) 2503.
- [5] S. Hosaka, T. Shintani, M. Miyamoto, A. Hirotsune, M. Terao *et al.*: *J. Appl. Phys.* **35** (1996) 443-447.
- [6] M. Shinoda, K. Saitoh, T. Ishimoto, T. Kondo, A. Nakaoki *et al.*: *Jpn. J. Appl. Phys.* **44** (2005) 3537-3541.
- [7] J. Tominaga, H. Fuji, A. Sato, T. Nakano, T. Fukaya *et al.*: *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2* **37** (1998) L1323-L1325.
- [8] T. Matsumoto, T. Shimano, H. Saga, H. Sukeda, M. Kiguchi: *J. Appl. Phys.* **95** (2004) 3901-3906.
- [9] B. C. Stipe, T. C. Strand, C. C. Poon, H. Balamane, T. D. Boone *et al.*: *Nat. Photonics* **4** (2010) 484-488.
- [10] T. Shiono, N. Yamada, K. Matsuzaki: International Patent Publication (PCT) **2013** WO/2013/021625.
- [11] T. Iida, A. Nakamura, S. Hidaka, M. Tamura, T. Shiono *et al.*: *Applied Physics Letters* **103** (2013) 041108.
- [12] T. Shiono, K. Matsuzaki and S. Furumiya: *Optics Express* **21** (2013) 25533.
- [13] N. Yamada, R. Kojima, K. Hisada, T. Mihara, A. Tsuchino *et al.*: *Adv. Optical Mater.* **1** (2013) 820-826.
- [14] K. Suzuki, H. Kobayashi, T. Sato, H. Yamashita and T. Watanabe: *Proc. SPIE* **8166**, *Photomask Technol. 2011* (2011) 81663B.
- [15] C. N. Afonso, J. Solis, F. Catalina and C. Kalpouzos: *Appl. Phys. Lett.* **60** (1992) 3123-3125.
- [16] N. Yasuda, Y. Fukuyama, S. Kimura, K. Ito, Y. Tanaka *et al.*: *Rev. Sci. Instrum.* **84** (2013) 063902.
- [17] P. Zalden, C. Bichara, J. van Eijk, C. Braun, W. Bensch *et al.*: *J. Appl. Phys.* **107** (2010) 104312.
- [18] C. N. Afonso, M. C. Morilla, J. Solis, N. H. Rizvi *et al.*: *Mater. Sci. Eng. A* **173** (1993) 343-346.
- [19] J. Solis, C. N. Afonso, J. F. Trull and M. C. Morilla: *J. Appl. Phys.* **75** (1994) 7788-7794.
- [20] T. Matsunaga, J. Akola, S. Kohara, T. Honma, K. Kobayashi *et al.*: *Nature Mater.* **10** (2011) 129-134.

山田 昇 YAMADA Noboru

京都大学 大学院工学研究科 材料工学専攻
〒606-8501 京都市左京区吉田本町
TEL : 075-753-5571
e-mail : yamada.noboru@kyoto-u.ac.jp

Long-term Proposal Report 2

Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) of Iron-Based Enzymes for Hydrogen Metabolism, Nitrogen Fixation, Small Molecule Sensing, DNA Repair, Photosynthesis, and Iron Storage

Project Leader: Stephen P. Cramer^{1,2}

Other Members: Hongxin Wang^{1,2}, Christie Dapper³, William E. Newton³, Hideaki Ogata⁴, Wolfgang Lubitz⁴, Jon M. Kuchenreuther⁵, James R. Swartz⁵, Nick LeBrun⁶, Yoshitaka Yoda⁷

¹Department of Chemistry, University of California, Davis, CA 95616

²Physical Biosciences Division, Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, CA 94720

³Department of Biochemistry, Virginia Polytechnic Institute, Blacksburg, VA 24061

⁴Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion, 45470 Mülheim an der Ruhr, Germany

⁵Department of Chemical Engineering, Stanford University, Stanford, CA 94305

⁶School of Chemistry, University of East Anglia, Norwich, UK NR4 7TJ

⁷Research & Utilization Division, Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI)/SPRING-8, Sayo-Cho, Hyogo, Japan

Introduction

Nuclear resonant vibrational spectroscopy (NRVS) involves scanning monochromatic (~1 meV) x-rays through a nuclear resonance (in this case ⁵⁷Fe) and monitoring transitions that correspond to vibrational modes. Over the latest phase of our program, we have used NRVS to monitor the reactions of small molecules with Fe-S proteins. The systems that we have examined include [FeFe] and [NiFe] hydrogenases that catalyze the

conversions between H₂ to electrons and protons, and nitrogenase, which converts N₂ to NH₃. We also work on Fe-S proteins that bacteria use as sensors of NO and O₂.

O₂ & NO 'Sensor' Progress

Fe-S clusters are important targets for NO-related physiological signal transduction^[1] as well as toxicity *via* interference with respiration and DNA replication^[2]. For example, the tuberculosis-causing bacterium

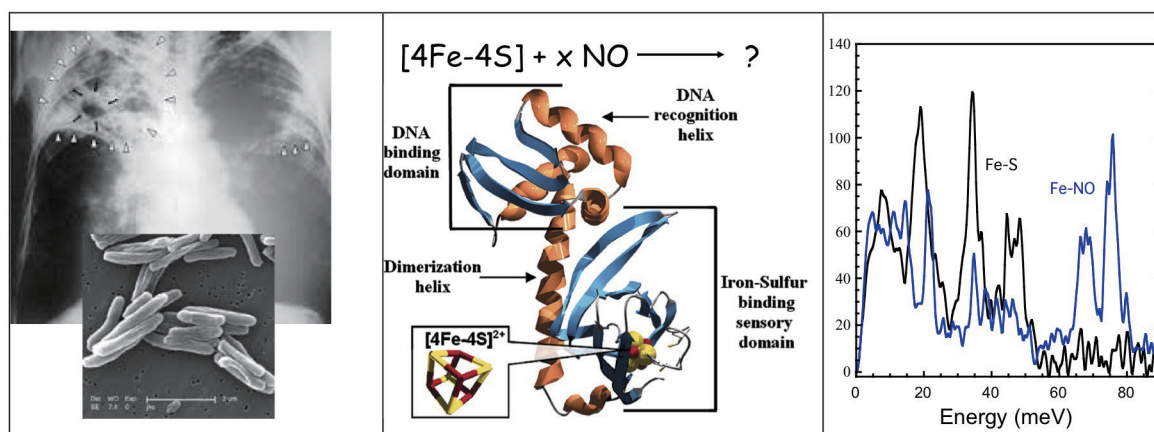


Figure 1. Left: evidence for tuberculosis in the lungs, and the bacteria that cause it. Middle: a typical Fe-S cluster sensor protein. Right: NRVS spectra for the natural (black) and NO treated WhiD proteins.

Mycobacterium tuberculosis uses an Fe-S cluster protein to sense the presence of NO and O₂ via its [4Fe-4S] cluster (Figure 1 left and middle). We have continued NRVS (Figure 1 right), EXAFS, and Mössbauer studies of NO reactivity with the WhiD proteins from the LeBrun lab. Our data showed that multiple NO ligands were bound to each Fe, but we found no evidence for intermediate species with substoichiometric amounts of NO. It appears that once the reaction with NO starts, subsequent decomposition steps are fast.

[FeFe] H₂ase Progress

In the [FeFe] subset of H₂ases, catalysis takes place at the so-called 'H-cluster', consisting of a [FeFe]_H subcluster active site linked to a [4Fe-4S] cluster via a cysteine thiolate sulfur (Figure 2). The unique Fe subcluster site has multiple CO and CN⁻ ligands, as well as a special bridging dithiolate with most likely N in the central position. In *Clostridium pasteurianum* H₂ase I (CpI)^[3], Fe is also present in the 'proximal' [4Fe-4S] cluster that is part of the H-cluster, in an additional three [4Fe-4S] 'F-clusters', as well as a [2Fe-2S] cluster.

As seen in Figure 2, despite the presence of many other Fe-S clusters, by selective enrichment we were able to enhance the signal from the [2Fe] subcluster site. The characteristic bands in the 500-600 cm⁻¹ range come from

the multiple Fe-CO modes of this cluster. This work has been published in *Biochemistry*^[4].

[NiFe] H₂ase Progress

In the [NiFe] subset of H₂ases, catalysis takes place at a Ni-Fe bimetallic center^[5]. In this active site, Fe is linked to Ni by a pair of cysteine thiolate ligands. The unique Fe site also has one CO and a pair of CN⁻ ligands, making it the first organoiron center to be discovered in Nature^[6]. [NiFe] H₂ases invariably possess additional Fe-S clusters that relay electrons to and from the active site. In the case of *Desulfovibrio vulgaris* Miyazaki F., this chain consists of a conventional 'proximal' [4Fe-4S] cluster, a 'medial' [3Fe-4S] cluster, and a 'distal' [4Fe-4S] cluster with 3 cysteine ligands and a histidine ligand, as illustrated in Figure 3 (upper panel).

As illustrated in Figure 3 (lower left), when the 400-650 cm⁻¹ region is magnified, peaks emerge that have intensities and frequencies consistent with Fe-CN and Fe-CO stretching and bending modes. In particular, the oxidized protein has two bands with maxima around 542 and 582 cm⁻¹, that shift to ~ 547 and ~ 605 cm⁻¹ in the reduced sample (reduced data not shown). These bands can be assigned to Fe-CO stretch and Fe-C-O bend modes, respectively. As frequently noted^[7], strong Fe-CO backbonding pushes the Fe-CO bend mode (in

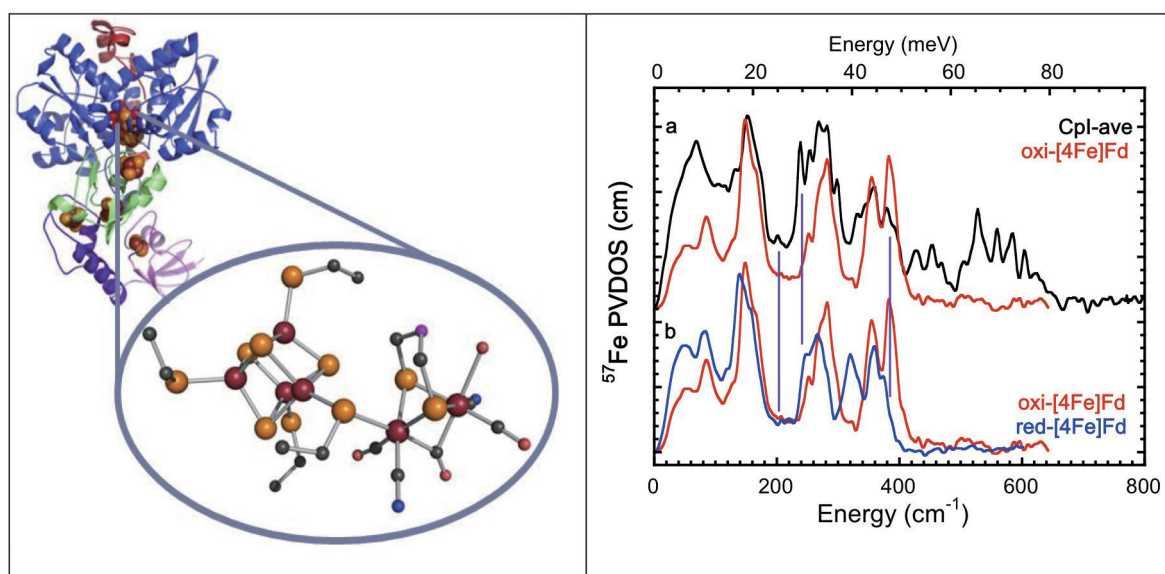


Figure 2. Left: The structure of the active site in [FeFe] H₂ase. Right: (a) ⁵⁷Fe PVDOS for ⁵⁷Fe-enriched Cpl [FeFe] H₂ase (—) vs. oxidized D14C Pf (—); (b) ⁵⁷Fe PVDOS for oxidized (—) vs. reduced (—) D14C Pf Fd.

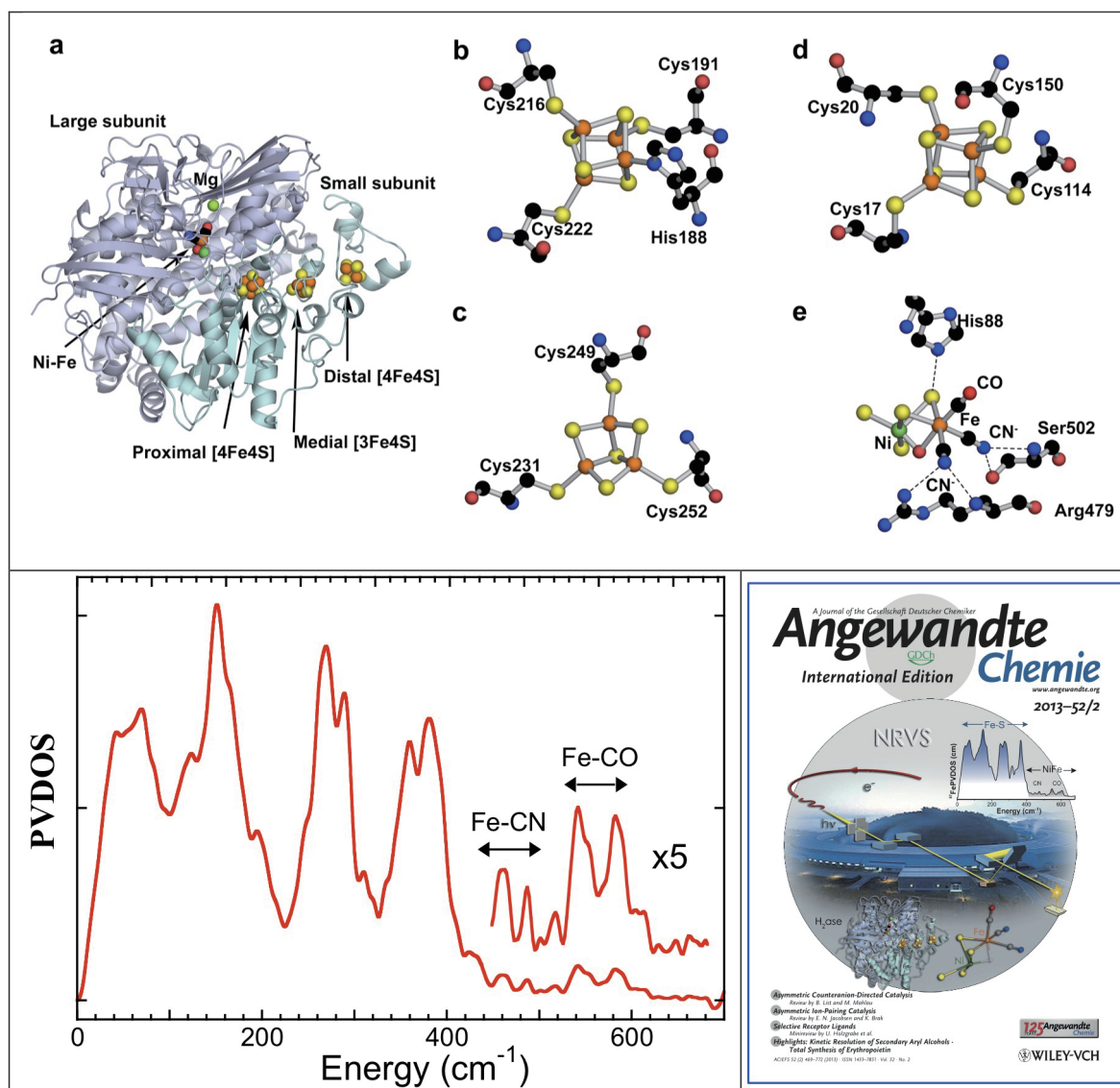


Figure 3. Top panel: The structures of the Fe sites in [NiFe] H₂ase. (a) overall view of the enzyme with 2 subunits, the catalytic Ni-Fe site and the electron transport chain; (b-e) detailed views of individual clusters, including: (b) ‘distal’ [4Fe-4S] cluster, showing Cys₃His ligation, (c) ‘medial’ [3Fe-4S] cluster, (d) ‘proximal’ [4Fe-4S], and (e) Ni-Fe active site with amino acid ligands. The atoms are Fe (orange), Ni (green), S (yellow), C (black), N (blue) and O (red)^[5]. Bottom panel: (left) the NRVS spectrum for NiFe H₂ase; (right) the cover story published in *Angewandte Chemie International Ed.* Volume 52 (2013) – reprint with permit from *Angewandte*.

this case at 582 cm⁻¹) to a higher frequency than the Fe-CO stretch mode (in this case at 542 cm⁻¹). Density functional theory (DFT) calculations have also shown that the bend mode mixes with a ‘tilt’ mode^[8]. The small shifts to higher frequency with reduction are consistent with the well-known inverse correlation between ν_{FeC} and ν_{CO} in FeCO complexes^[9-12]. This work was recognized as a cover article in *Angewandte Chemie* (Figure 3, lower right).

More recently, we have pushed to higher frequencies to observe bands associated with Fe-H or Fe-D motion. In a hydride-bridged model compound, we observed not only Fe-H/D modes but also a characteristic Ni-H-Fe ‘wag’, and a candidate Ni-H-Fe ‘wag’ mode was also seen in the reduced Ni-R form of [NiFe] H₂ase (Figure 4). This confirms that the hydride in Ni-R is a bridging H, and it eliminates other candidates that involved H bound solely to Ni or Fe.

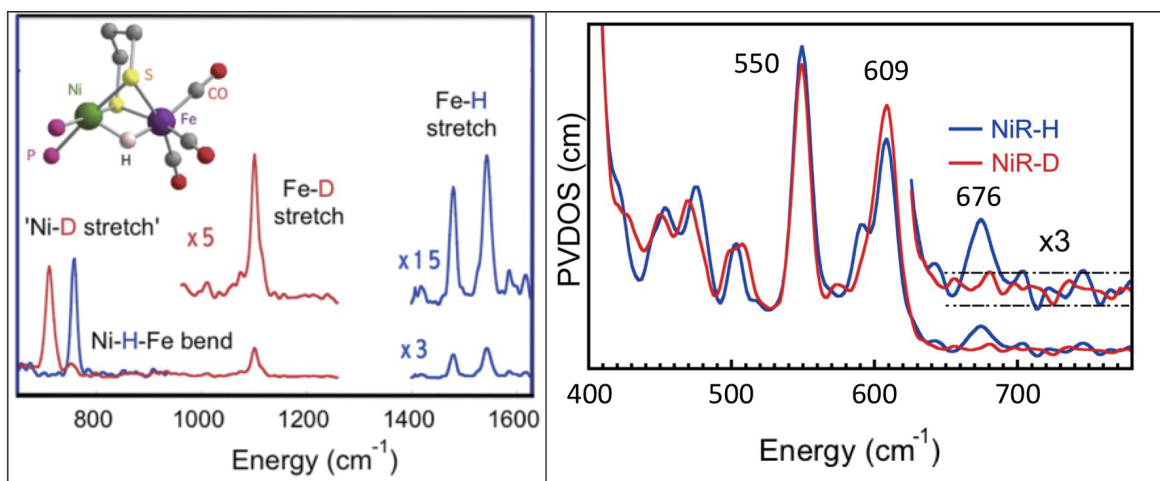


Figure 4. Left: Recent data on a model compound showing not only Fe-H/D modes but also Ni-H-Fe bend ('wag'). Right: Observation of candidate Ni-H-Fe 'wag' mode in [NiFe] H₂ase.

N₂ase Progress

Nitrogenase (N₂ase) is the enzyme responsible for biological nitrogen fixation^[13-15]. In the *Azotobacter vinelandii* (Av) Mo-dependent nitrogenase (N₂ase), this catalysis takes place at an active site MoFe₇S₉ 'FeMo cofactor' (Figure 5, upper left). It is now known that N₂ase

can also produce C_xH_y hydrocarbons from CO^[16-18] and even CH₄ from CO₂^[19,20]. We have used NRVS to characterize the effects of CO bonding on the normal modes of the FeMo cofactor.

As seen in Figure 5 (right panel), dramatic changes in the NRVS are seen under high-CO conditions, especially

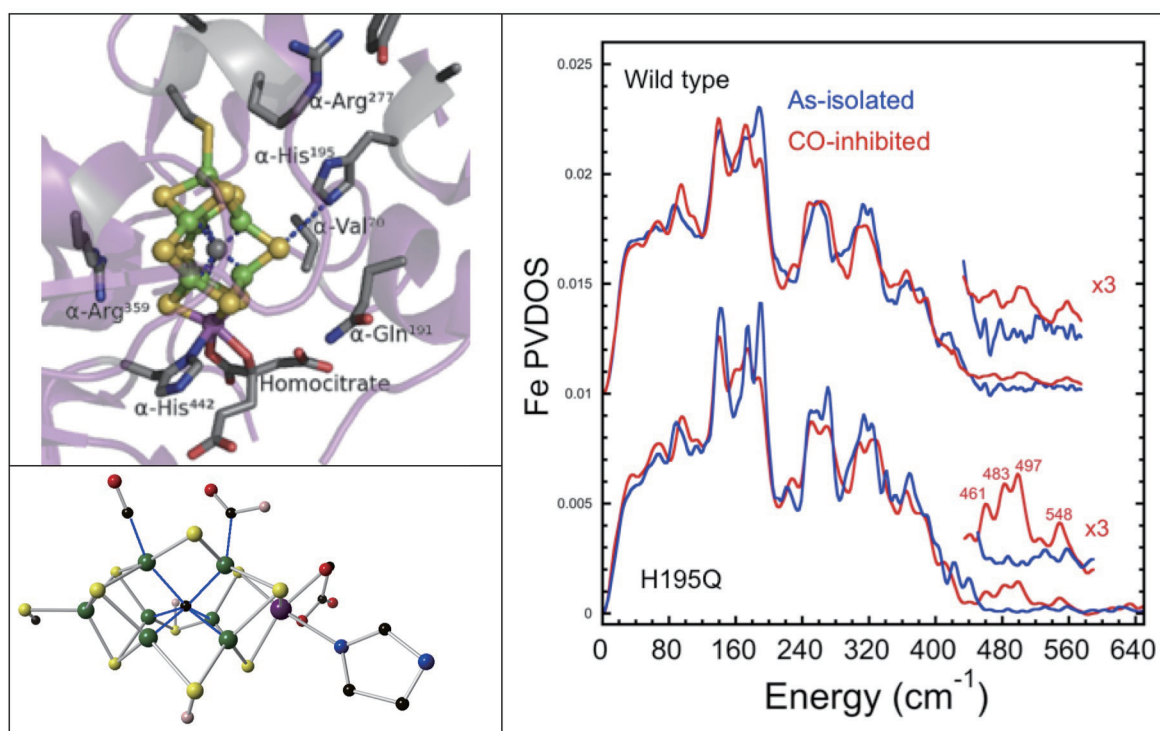


Figure 5. Top left: structure of the N₂ase MoFe protein structure around the FeMo-cofactor for the wild-type enzyme. Bottom left: one of the structures proposed for CO-inhibited wild-type enzyme. Right: ⁵⁷Fe NRVS for wild-type (top) and H195Q Av (bottom) N₂ase under as-isolated (—) and high-CO (—) conditions.

in a 188 cm^{-1} mode associated with symmetric ‘breathing’ of the [6Fe-**X**] central cage of the FeMo-cofactor. Similar changes are reproduced with the α -H195Q N₂ase variant. In the frequency region above 450 cm^{-1} , additional features are seen that are assigned to Fe-CO bending and stretching modes, and these assignments have been confirmed by observation ¹³C isotope shifts. An example of one of our candidate DFT models to explain CO inhibition is illustrated in Figure 5 (lower left).

Acknowledgements

This work was funded by NIH GM-65440, NSF CHE-0745353, and the DOE Office of Biological and Environmental Research. These experiments were performed at BL09XU/SPring-8 with the approval of the Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI; Proposal No. 2010B0032-2013A0032).

Publications from this Project

- [1] “Characterization of Iron Dinitrosyl Species Formed in the Reaction of Nitric Oxide with a Biological Rieske Center”, Tinberg, C. E.; Tonzetich, Z. J.; Wang, H.; Do, L. H.; Yoda, Y.; Cramer, S. P.; Lippard, S. J. *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, *132*, 18168-18176.
- [2] “Fe-H/D stretching and bending modes in nuclear resonant vibrational, Raman and infrared spectroscopies: Comparisons of density functional theory and experiment”, Pelmenschikov, V.; Guo, Y.; Wang, H.; Cramer, S. P.; Case, D. A. *Faraday Disc.*, **2011**, *148*, 409-420.
- [3] “Dynamics of the [4Fe-4S] Cluster in *Pyrococcus furiosus* D14C Ferredoxin via Nuclear Resonance Vibrational and Resonance Raman Spectroscopies, Force Field Simulations, and Density Functional Theory Calculations”, Mitra, D.; Pelmenschikov, V.; Guo, Y.; Case, D. A.; Wang, H.; Dong, W.; Tan, M.-L.; Ichiye, T.; Francis E.; Jenney, J.; Adams, M. W. W.; Yoda, Y.; Zhao, J.; Cramer, S. P. *Biochemistry*, **2011**, *50*, 5220–5235.
- [4] “Characterization of a Synthetic Peroxodiiron(III) Protein Model Complex by Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy”, Do, L. H.; Wang, H.; Tinberg, C. E.; Dowty, E.; Yoda, Y.; Cramer, S. P.; Lippard, S. J. *Chem. Commun.*, **2011**, *47*, 10945-10947.
- [5] “EXAFS and NRVS Reveal a Conformational Distortion of the FeMo-cofactor in the MoFe Nitrogenase Propargyl Alcohol Complex”, George, S. J.; Barney, B. M.; Mitra, D.; Igarashi, R. Y.; Guo, Y.; Dean, D. R.; Cramer, S. P.; Seefeldt, L. C. *J. Inorg. Biochem.*, **2012**, *112*, 85-92.
- [6] “Nuclear resonance vibrational spectroscopy (NRVS) of rubredoxin and MoFe protein crystals”, Guo, Y.; Brecht, E.; Aznavour, K.; Nix, J.; Xiao, Y.; Wang, H.; George, S.; Bau, R.; Keable, S.; Peters, J.; Adams, M. W.; Jr, F. J.; Sturhahn, W.; Alp, E.; Zhao, J.; Yoda, Y.; Cramer, S. P. *Hyperfine Interact.*, **2013**, *222*, 77-90.
- [7] “Real sample temperature: a critical issue in the experiments of nuclear resonant vibrational spectroscopy on biological samples”, Wang, H. X.; Yoda, Y.; Kamali, S.; Zhou, Z. H.; Cramer, S. P. *J. Synchrotron Rad.*, **2012**, *19*, 257-263.
- [8] “Observation of the Fe-CN and Fe-CO Vibrations in the Active Site of [NiFe] Hydrogenase by Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy”, Kamali, S.; Wang, H.; Mitra, D.; Ogata, H.; Lubitz, W.; Manor, B. C.; Rauchfuss, T. B.; Byrne, D.; Bonnefoy, V.; Jenney Jr., F. E.; Adams, M. W. W.; Yoda, Y.; Alp, E.; Zhao, J.; Cramer, S. P. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2013**, *52*, 724–728.
- [9] “Characterization of [4Fe-4S] Cluster Dynamics and Structure in Nitrogenase Fe Protein at Three Oxidation Levels via Combined NRVS, EXAFS and DFT Analyses”, Mitra, D.; George, S. J.; Guo, Y.; Kamali, S.; Keable, S.; Peters, J. W.; Pelmenschikov, V.; Case, D. A.; Cramer, S. P. *J. Am. Chem. Soc.*, **2013**, *135*, 2530–2543.
- [10] “Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy and Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy of ⁵⁷Fe-Enriched [FeFe] Hydrogenase Indicate Stepwise Assembly of the H-Cluster”, Kuchenreuther, J. M.; Guo, Y.; Wang, H.; Myers, W. K.; George, S. J.; Boyke, C. A.; Yoda, Y.; Alp, E. E.; Zhao, J.; Britt, R. D.; Swartz, J. R.; Cramer, S. P. *Biochemistry*, **2013**, *52*, 818–826.
- [11] “Synchrotron Radiation Based Nuclear Resonant Scattering: Applications to Bioinorganic Chemistry”, Guo, Y.; Yoda, Y.; Zhang, X.; Xiao, Y.; Cramer, S. P., in *Mössbauer Spectroscopy: Applications in Chemistry, Biology, Industry, and Nanotechnology*;

Sharma, V. K.; Klingelhofer, G.; Nishida, T.; Ed. Wiley, **2013**, 246-271.

References

- [1] "Direct nitric oxide signal transduction via nitrosylation of iron-sulfur centers in the SoxR transcription activator", Ding, H. G.; Demple, B. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, **2000**, *97*, 5146-5150.
- [2] "Interplay between NO and Fe-S clusters: Relevance to biological systems", Drapier, J. C. *Methods*, **1997**, *11*, 319-329.
- [3] "X-ray Crystal Structure of the Fe-Only Hydrogenase (CpI) from *Clostridium pasteurianum* to 1.8 Angstrom Resolution", Peters, J. W.; Lanzilotta, W. N.; Lemon, B. J.; Seefeldt, L. C. *Science*, **1998**, *282*, 1853-1858.
- [4] "Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy and Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy of ⁵⁷Fe-Enriched [FeFe] Hydrogenase Indicate Stepwise Assembly of the H-Cluster", Kuchenreuther, J. M.; Guo, Y.; Wang, H.; Myers, W. K.; George, S. J.; Boyke, C. A.; Yoda, Y.; Alp, E. E.; Zhao, J.; Britt, R. D.; Swartz, J. R.; Cramer, S. P. *Biochemistry*, **2013**, *52*, 818-826.
- [5] "NiFe hydrogenases: structural and spectroscopic studies of the reaction mechanism", Ogata, H.; Lubitz, W.; Higuchi, Y. *Dalton Trans.*, **2009**, *37*, 7577-7587.
- [6] "Biological Activation of Hydrogen", Happe, R. P.; Roseboom, W.; Pierik, A. J.; Albracht, S. P. J.; Bagley, K. A. *Nature*, **1997**, *385*, 126.
- [7] "Quantitative Vibrational Dynamics of Iron in Carbonyl Porphyrins", Leu, B. M.; Silvernail, N. J.; Zgierski, M. Z.; Wyllie, G. R. A.; Ellison, M. K.; Scheidt, W. R.; Zhao, J.; Sturhahn, W.; Alp, E. E.; Sage, J. T. *Biophys. J.*, **2007**, *92*, 3764-3783.
- [8] "Carbonyl Tilting and Bending Potential Energy Surface of Carbon Monoxyhememes", Ghosh, A.; Bocian, D. F. *J. Phys. Chem.*, **1996**, *100*, 6363-6367.
- [9] "Is Bound CO Linear or Bent in Heme-Proteins - Evidence from Resonance Raman and Infrared Spectroscopic Data", Li, X. Y.; Spiro, T. G. *J. Am. Chem. Soc.*, **1988**, *110*, 6024-6033.
- [10] "Connection between the taxonomic substates and protonation of histidines 64 and 97 in carbonmonoxy myoglobin", Müller, J. D.; McMahon, B. H.; Chien, E. Y. T.; Sligar, S. G.; Nienhaus, G. U. *Biophys. J.*, **1999**, *77*, 1036-1051.
- [11] "CO as a vibrational probe of heme protein active sites", Spiro, T. G.; Wasbotten, I. H. *J. Inorg. Biochem.*, **2005**, *99*, 34-44.
- [12] "Vibrational Analysis of the Model Complex (μ-edt)[Fe(CO)₃]₂ and Comparison to Iron-Only Hydrogenase: The Activation Scale of Hydrogenase Model Systems", Galinato, M. G. I.; Whaley, C. M.; Lehnert, N. *Inorg. Chem.*, **2010**, *49*, 3201-3215.
- [13] "Climbing Nitrogenase: Toward a Mechanism of Enzymatic Nitrogen Fixation", Hoffman, B. M.; Dean, D. R.; Seefeldt, L. C. *Acc. Chem. Res.*, **2009**, *42*, 609-619.
- [14] "Mechanism of Mo-Dependent Nitrogenase", Seefeldt, L. C.; Hoffman, B. M.; Dean, D. R. *Ann. Rev. Biochem.*, **2009**, *78*, 701-722.
- [15] "The Evolution and Future of Earth's Nitrogen Cycle", Canfield, D. E.; Glazer, A. N.; Falkowski, P. G. *Science*, **2010**, *330*, 192-196.
- [16] "Vanadium Nitrogenase Reduces CO", Lee, C. C.; Hu, Y.; Ribbe, M. W. *Science*, **2010**, *329*, 642.
- [17] "Tracing the Hydrogen Source of Hydrocarbons Formed by Vanadium Nitrogenase", Lee, C. C.; Hu, Y. L.; Ribbe, M. W. *Angew. Chem.*, **2011**, *50*, 5545-5547.
- [18] "Molybdenum Nitrogenase Catalyzes the Reduction and Coupling of CO to Form Hydrocarbons", Yang, Z.-Y.; Dean, D. R.; Seefeldt, L. C. *J. Biol. Chem.*, **2011**, *286*, 19417-19421.
- [19] "Carbon dioxide reduction to methane and coupling with acetylene to form propylene catalyzed by remodeled nitrogenase", Yang, Z.-Y.; Moure, V. R.; Dean, D. R.; Seefeldt, L. C. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, **2012**, *109*, 19644-19648.
- [20] "Nitrogenase reduction of carbon-containing compounds", Seefeldt, L. C.; Yang, Z.-Y.; Duval, S.; Dean, D. R. *Biochim Biophys Acta*, **2013**, *1827*, 1102-1111.

SACLA における 2 色レーザー発振

独立行政法人理化学研究所 放射光科学総合研究センター
XFEL 研究開発部門 原 徹

Abstract

XFEL は波長可変性と横方向のコヒーレンスに加え、フェムト秒の短パルス性、100 GW レベルの高ピークパワーを兼ね備えており、超高速現象や反応過程を動的に精度よく観察するには最適な X 線光源である。2 色 XFEL では、シケインを挟んでアンジュレータを 2 つのセクションに分割し、各セクションで異なる波長でレーザーを発振させ、2 つの X 線パルスを生産する。各セクションの K 値を調整することで 2 波長とも可変であり、2 パルス間の時間差はシケインで電子ビームを遅延させることにより高精度で調整することができる。同じ電子ビームから 2 つのパルスを生産するため、2 パルス間の時間ジッターはほとんどなく、X 線ポンプ X 線プローブ実験など 2 色 XFEL を用いた新しい実験手法の開拓が期待される。

1. はじめに

X 線自由電子レーザー (X-ray Free-Electron Laser, XFEL) は、X 線波長領域では誘導放射を利用した唯一の実用光源で、放射光に比べピークパワーで 10 桁近く強い光が得られる。XFEL は、電子ビームを長いアンジュレータに 1 回通すことにより、ランダムな電子分布から放射されるノイズ (放射光) を誘導放射によって増幅する。この増幅プロセスは SASE (Self-Amplified Spontaneous Emission) ^[1,2] と呼ばれ、増幅後の光パルスのスペクトルや時間波形は、初期ノイズに起因したパルス毎にランダムに変化するスパイク構造をもつことが知られている。SACLA (SPring-8 Angstrom Compact free-electron LAsEr) ^[3] は、アメリカの LCLS ^[4] に次いで、世界で 2 番目に完成した XFEL 施設であり、2012 年 3 月よりユーザー利用実験への供用を開始した。SASE-XFEL は、光源として既に技術的には確立しており、日米 2 施設のほか、ド

イツやスイス、韓国などでも XFEL 施設を現在建設中である。

XFEL の光源性能を高める高度化の手法については、既に様々なアイデアが提案され、世界中で研究開発が進んでいる。高度化の一つの方向性は、SASE の光パルスがもつスパイク構造の解消、即ち時間コヒーレンスの改善である。時間コヒーレンスを改善する手法として、外部コヒーレントシード光を利用した HGHG (High-Gain Harmonic Generation) ^[5] や EEHG (Echo-Enabled Harmonic Generation) ^[6]、単色化した SASE を増幅する self-seeding ^[7] などの手法が提案され、いずれも実験的に実証されている。特に HGHG-FEL では、イタリアの FERMI ^[8] が軟 X 線領域での発振に成功しており、ユーザー実験が既に行われている。結晶を利用した分光が可能な X 線領域の self-seeding では、アンジュレータ途中に置いた 1 枚のダイヤモンド結晶を用いて上流側アンジュレータ

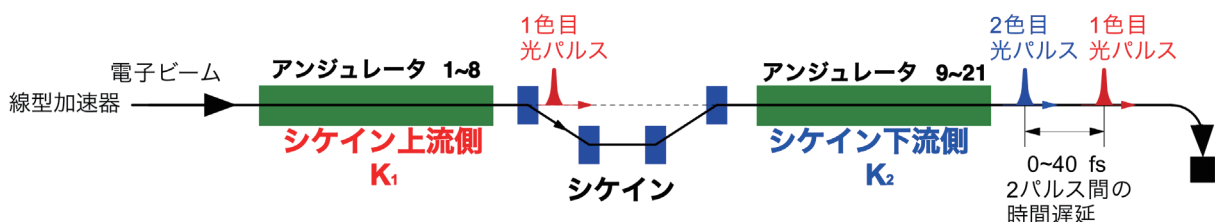


図 1 2 色 XFEL 運転時のアンジュレータ部の概要

からの SASE を単色化し、下流側アンジュレータでそれを増幅することに LCLS が成功しており^[9]、SACLA でも self-seeding 導入の準備を進めている。

一方、時間コヒーレンスの改善とは別の高度化の方向には、XFEL を使ったアト秒 X 線パルスの発生^[10]や、異なる波長で同時にレーザー発振させる 2 色 XFEL などがあり、新たな利用実験の開拓につながる事が期待されている。もちろん複数の高度化手法を組み合わせて、時間コヒーレントなアト秒パルスや 2 色レーザー光を得ることも将来可能になるであろう。本稿では、SACLA で行われている 2 色 XFEL について紹介する^[11]。

2. 2 色 XFEL

図 1 に、2 色 XFEL 運転時のアンジュレータ部の概要を示す。SACLA BL3 には 5 m 長の真空封止アンジュレータ (図 2) が 21 台あり、8 台目と 9 台目のアンジュレータ間に self-seeding 用シケインが設置されている。シケインの全長はアンジュレータ 1 台分の長さに等しい。2 色 XFEL では、21 台のアンジュレータをシケイン上下流 2 つのセクションに分け、各セクションで独立にレーザーを発振させる。各セクションのアンジュレータ K 値を変えることにより、2 つのレーザーパルスの波長は独立に調整可能である。

上下流のセクションから放射される 2 パルス間の時間差は、シケインで電子ビームを迂回させることで、現状 0~40 フェムト秒の範囲で変えることができ、近い将来シケイン偏向電磁石の更新により 0~200 フェムト秒まで広げる予定である。2 パルスは同じ電子ビームから放射されるため時間差のジッターが原理的になく、電子ビームとシケイン電磁石

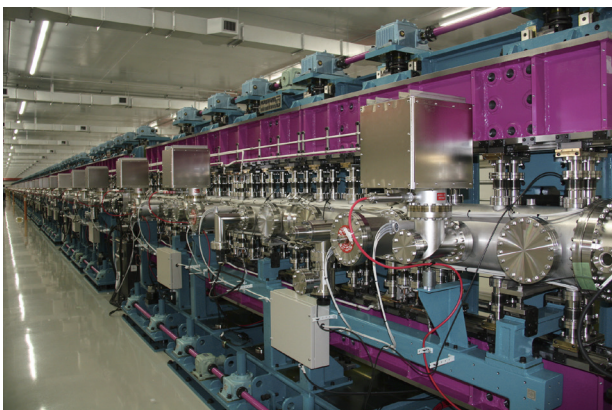


図 2 SACLA 真空封止アンジュレータ

電源のふらつきから推定される時間差の精度は、数 10 アト秒オーダーと極めて高精度である。現状の SACLA 光パルス長は、10 フェムト秒 (FWHM) 以下であることが確認されているが^[12]、将来更に短パルス化することができれば、サブフェムト秒のダイナミクスの探求も視野に入る。

2 色 XFEL のスペクトル測定例を図 3 に示す。図 3 では 7.8 GeV の電子ビームを使い、上流側アンジュレータセクションの K 値を 1.7 に、下流側セクションの K 値を 2.15 に設定して、各々 13.1 keV と 9.7 keV の 2 つのレーザーパルスを発生させている。図 3 のスペクトルは、2 結晶分光器を用いて測定した時間平均されたスペクトルで、2 色パルスのパルスエネルギーは、各々 40 μ J 程度である。

下流側 2 色目の SASE プロセスは、上流側 1 色目のレーザー発振によってエネルギーブレッドが増加した電子ビームを用いて行われるため、1 色目に比べレーザーの増幅ゲインが低くなる。特に上流側で 1 色目パルスを飽和まで増幅してしまうと、2 色目のゲインがなくなり 2 色発振させることはできない。このため 2 パルス間の出力比を見ながら、上下流のアンジュレータ台数を調整する必要がある。逆にアンジュレータ台数を調整することで、利用実験に最適な出力比を得ることができる。

図 4 (a) では上流側アンジュレータ 8 台の K 値を 1.92 に、下流側 10 台の K 値を 2.1 に設定し測定した 2 色 XFEL の時間平均スペクトルである。このときの 2 色合計の出力は約 130 μ J であるが、図から見てわかるように、下流側 2 色目のパルスエネルギーは上流側 1 色目に比べ小さい。図 4 (b) では、1

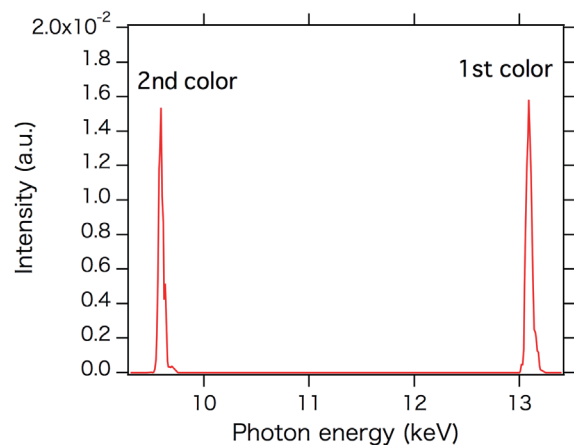


図 3 2 色 XFEL の時間平均スペクトル。スペクトルは 2 結晶分光器を用いて測定。上流側アンジュレータ K 値は $K_1=1.7$ 、下流側は $K_2=2.15$ 。

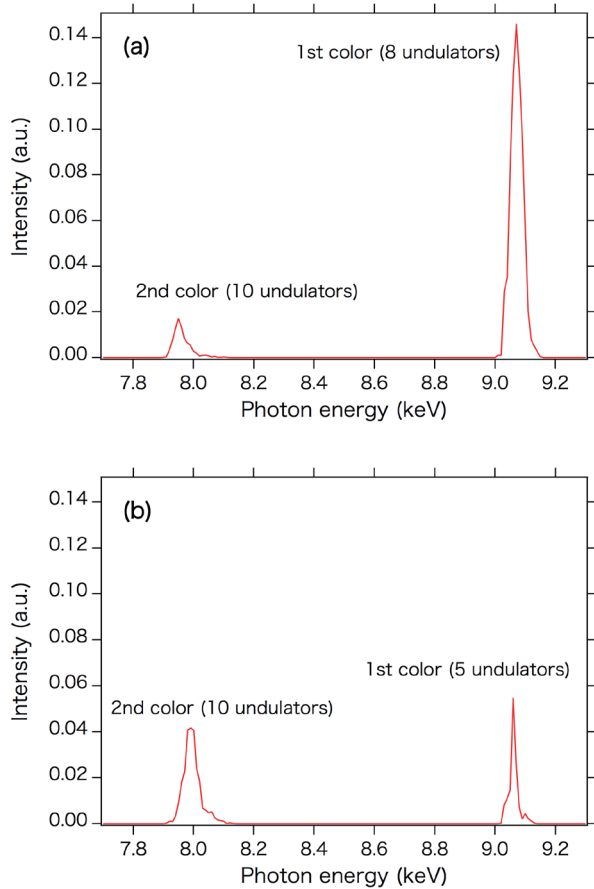


図4 2色パルスの出力比。(a) 上流側アンジュレータ ($K_1=1.92$) 8台、下流側 ($K_2=2.1$) 10台使用した場合の時間平均スペクトル、(b) 上流側 ($K_1=1.92$) 5台、下流側 ($K_2=2.1$) 10台の場合の時間平均スペクトル。

色目の出力を下げるため、上流側アンジュレータ台数を5台に減らした時のスペクトルである。上流側1色目の出力を下げることにより、電子ビームエネルギー Spredd の増加が抑えられるため、2色目パルスの出力が上がっていることがわかる。しかしながら2色XFELでは、SASEプロセスをノイズか

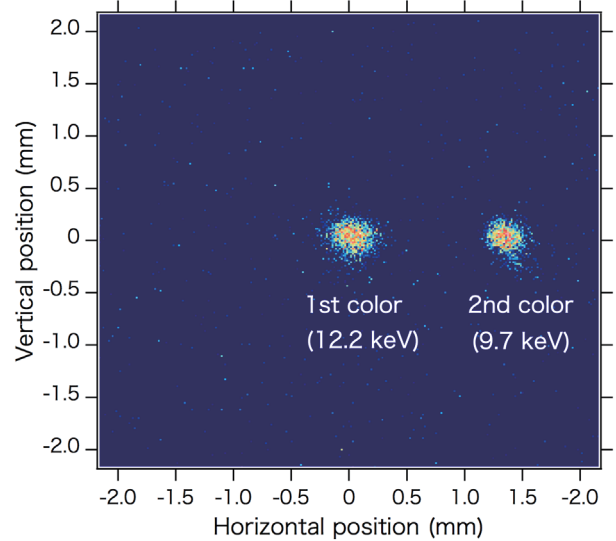


図6 シケインから約130 m 下流にあるビームラインのスクリーンで測定した2色パルスの空間プロファイル。電子ビーム軌道は、シケインにおいて水平方向 $10 \mu\text{rad}$ の角度を付けている。 $K_1=1.8$ 、 $K_2=2.15$ 。

ら2回立ち上げるため、全アンジュレータを使って単一波長でレーザー発振させた場合のパルスエネルギー $250 \mu\text{J}$ ($K=2.1$) や $200 \mu\text{J}$ ($K=1.9$) に比べると、2色XFELの出力は2色合計しても半分程度となる。

3. 2色パルスの空間分離

2色XFELの2つのSASEプロセスは互いに独立であるため、図5のようにシケインで電子ビーム軌道に角度を付け、1色目と2色目の光パルスを互いに異なる光軸で発振させることも可能である。但しアンジュレータや四極電磁石などの機器は、この角度を付けた電子ビーム軌道に対して直線上に並べる必要がある。幸いにもSACLAアンジュレータ部の機器は、コンクリートの収縮や地盤変化による床面の形状変化に追従して電子ビーム軌道のアライメン

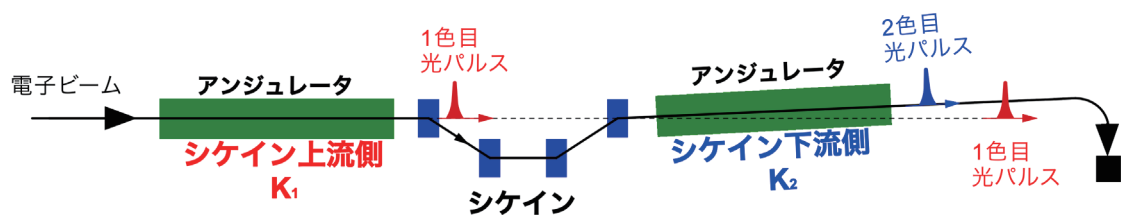


図5 2色パルスの空間分離。シケイン下流側電子ビーム軌道に角度を付け、ビームラインで2色のパルスを空間的に分離。

トが行えるよう、全てサブミクロンの高精度位置調整機構を備えており、遠隔で位置制御が可能である。

異なる光軸に放射された2つのパルスは、ビームラインでは空間的に分離される。図6は、シケインで下流側電子ビーム軌道に水平方向10 μ radの角度を付け、2色の2つの光パルスを約130 m下流のビームラインスクリーン上で空間的に分離した例である。このように2色XFELの2つの光パルスは、スペクトルだけでなく空間的にも分離することができ、例えば異なる方向から試料に異なる2波長のX線パルスを照射することも可能である。

4. まとめ

2色FELは、1990年代に光共振器型の赤外線FELで初めて実験的に確認され^[13]、その後真空紫外^[14]や軟X線の短波長領域^[15]でも報告がある。しかしながらこれらの2色FELでは、共振器や外部レーザー、固定アンジュレータギャップなどの要因により、2波長の相対的な差がいずれも数%程度に制限されていた。SACLAでは世界で初めて硬X線領域で2色FELを実現しただけでなく、磁石ギャップが変えられる真空封止アンジュレータを用いることで、2波長の差を最大30%程度まで広げることに成功している。FELの波長は、アンジュレータ放射光と同様に電子ビームエネルギーとK値で決まるが、2つの波長を同じ電子ビームを使って出す場合、大きな波長差を得るためには必然的にK値の可変性、即ち可変ギャップアンジュレータが必須となる。

これまでXFEL利用実験では現象や反応を動的に観察するための手法として、XFELのX線パルスと外部同期レーザーからの可視光パルスを組み合わせたポンププローブ測定が主に用いられてきた。しかしながら2つの光源間の時間ジッター、X線と可視光という大きなエネルギー差、物質への侵入長の違いなどがしばしば実験の制約となっていた。2色XFELでは、2つのパルスを同じ電子ビームから生成するため時間ジッターがなく、両波長ともX線領域でかつ可変性を有し、また空間的にも分離することも可能である。X線ポンプX線プローブ実験など、これまでになく実験手法への2色XFELの利用が期待される。

参考文献

- [1] A. M. Kondratenko and E. L. Saldin: *Part. Accel.* **10** (1980) 207-216.
- [2] R. Bonifacio, C. Pellegrini and L. M. Narducci: *Opt. Commun.* **50** (1984) 373-377.
- [3] T. Ishikawa *et al.*: *Nat. Photon.* **6** (2012) 540-544.
- [4] P. Emma *et al.*: *Nat. Photon.* **6** (2010) 641-647.
- [5] L. H. Yu *et al.*: *Science* **289** (2000) 932-934.
- [6] G. Stupakov: *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 074801.
- [7] G. Geloni, V. Kocharyan and E. Saldin: *J. Mod. Opt.* **58** (2011) 1391-1403.
- [8] E. Allaria *et al.*: *Nat. Photon.* **7** (2013) 913-918.
- [9] J. Amann *et al.*: *Nat. Photon.* **6** (2012) 693-698.
- [10] T. Tanaka: *Phys. Rev. Lett.* **110** (2013) 084801.
- [11] T. Hara *et al.*: *Nat. Commun.* **4** (2013) 2919.
- [12] K. Tamasaku *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **111** (2013) 043001.
- [13] D. A. Jaroszynski, R. Prazeres, F. Glotin and J. M. Ortega: *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994) 2387-2390.
- [14] G. De Ninno, B. Mahieu, E. Allaria, L. Giannessi and S. Spampinati: *Phys. Rev. Lett.* **110** (2013) 064801.
- [15] A. A. Lutman *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **110** (2013) 134801.

原 徹 HARA Toru

(独)理化学研究所 放射光科学総合研究センター
XFEL 研究開発部門 加速器研究開発グループ 先端ビームチーム
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0802 ext 3804
e-mail : toru@spring8.or.jp

SACLA のイメージングデータ解析の現状

公益財団法人高輝度光科学研究センター
XFEL 利用研究推進室 城地 保昌

Abstract

X線自由電子レーザーは、大強度のフェムト秒 X線レーザーパルスを発生できる新しい高輝度光源である。X線自由電子レーザー施設 SACLA では、供用開始から約2年間、物理、化学、生物、材料科学など様々な分野で利用研究の開拓が進められてきた。本稿では、SACLA におけるコヒーレント回折イメージング解析とシリアルフェムト秒結晶構造解析の現状を紹介する。併せて、これらの SACLA 利用実験のデータ収集および解析の共通基盤システムの現状を紹介する。

1. はじめに

X線自由電子レーザー (XFEL) は、波の位相がきれいに揃ったレーザー光の性質をもつ超高輝度の X線を発生できる光源である。XFEL 施設 SACLA では、2012年3月の供用開始後、物理、化学、生物、材料科学など様々な分野で利用研究の開拓が進められてきた。XFEL 利用によるコヒーレント回折イメージング (CDI) とシリアルフェムト秒結晶構造解析 (SFX) は、従来の X線構造解析の難点であった放射線損傷の問題を克服できると期待されている。CDI や SFX では、超高輝度の XFEL パルスにより一発の照射で試料を破壊してしまうが、フェムト秒オーダーの超短パルスにより破壊される前の試料からの回折パターンを取得する“diffraction-before-destruction”と呼ばれるアプローチを採っている。

電子線に比べて透過力の高い X線を利用した CDI は、非結晶粒子の構造研究で期待される手法である。従来の X線光源では、高解像度で試料を観察できるのは、周期構造をもつ結晶試料に限定されていた。CDI では、試料に位相の揃ったコヒーレント X線を照射し、スペックルと呼ばれる斑点模様状の2次元回折パターンを高い空間分解能で取得する。この回折パターンは、試料の電子密度 (構造) のフーリエ変換である構造因子の2乗に比例する。構造因子は干渉波の様態を記述するが、波としての重要な情報である位相が検出時に欠落し、振幅情報のみが得られ、そのままでは原の構造を求めること

はできない。この問題に対し CDI では、高い空間分解能で取得した回折振幅データに位相回復法と呼ばれるアルゴリズム^[1]を用いることで、試料の電子密度を決定することが可能である。

SFX は、XFEL の利用に伴い、近年急速に広まりつつある新しい生体分子構造解析法である^[2]。生命現象を理解する上で重要であり、また、創薬における重要な解析ターゲットである膜タンパク質などの試料では、その結晶化が困難であり、マイクロメートル程度の微小結晶しか得られない場合がある。超高輝度の XFEL を利用すると、このような結晶からの回折光を検出することが可能となる。また、フェムト秒オーダーの XFEL パルスの照射毎に「新鮮な」状態の結晶を用いることにより、放射光で問題となっていたラジカルなどに起因する X線照射損傷がない状態の解析が可能となる。SFX で得られる膜タンパク質の結晶構造は、コンピュータによる解析を援用するインシリコ創薬の重要なターゲットとなると期待されている。

本稿では、SACLA における CDI と SFX の実験データ解析の現状について紹介する (2、3節)。さらに、これらの実験データ解析を支える共通基盤システムの現状を紹介する (4節)。

2. CDI 実験データ解析の現状

SACLA における CDI では、実験装置としてクライオ試料固定照射装置“壽壺号”^[3]と汎用コヒーレントイメージング装置“MAXIC”^[4]が主に利用

されている。

壽壺号^[3]は、慶応大学の中迫雅由教授らにより開発された実験装置であり、予め支持膜上に散布凍結固定後に液体窒素中に保存した試料を、低温冷却試料台に搬送し、ゴニオメーターで試料位置を操作して照射実験を行うことができる。壽壺号利用時に、試料粒子にXFELパルスがヒットする率は、20～100%であり（粒子散布密度により異なる）、その他の現状と比べて非常に高い。中迫教授らは、壽壺号による測定で得られる大量の回折パターンを高速かつ自動で処理するために、データ処理ソフトウェア“四天王”^[5]の開発も行っている。中迫教授らの実験では、このソフトウェアを後述のデータ解析システムで動作させることにより、測定終了後直ちに、位相回復までの処理を自動で行うことが可能となっている。壽壺号の利用実験では、これまでに金属ナノ粒子の粒子サイズ分布などで成果を挙げている^[6]。中迫教授らは、生物試料の測定も精力的に行っており、近い将来の成果創出が期待される。

MAXIC (Multiple Application X-ray Imaging Chamber)^[4]は、理化学研究所のC. Song チームリーダーらにより開発された装置で、固定試料のスキャンと液体ジェットによる試料導入の両方に対応可能である。液体ジェットによる実験は、SFX 実験に利用できる(図1)^[4]。MAXICでは、可視光レーザーで状態を励起し、その応答としての構造変化を追跡するポンププローブ CDI 実験も行われている。一方、北海道大学の西野吉則教授らは、MAXICを利用してパルス状 X 線溶液散乱 (PCXSS) 法を開発している。PCXSS 法では、生物試料をマイクロ液体封入アレイ (MLEA) チップと呼ばれる独自開発の

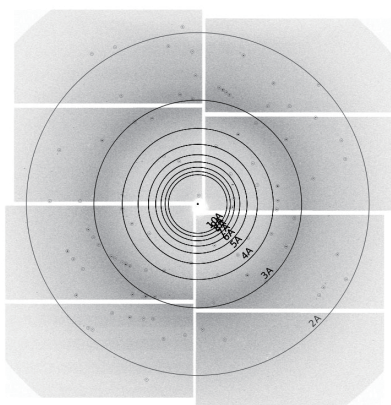


図1 MAXIC を利用した SFX 実験によるリゾチム結晶からの回折像の例

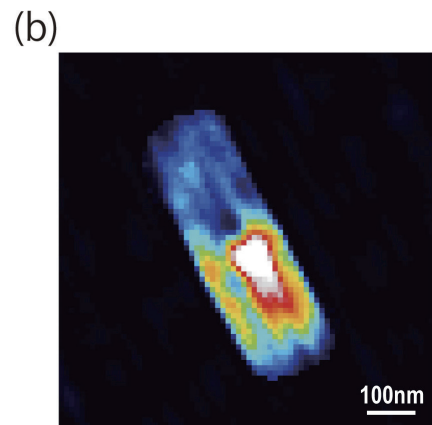
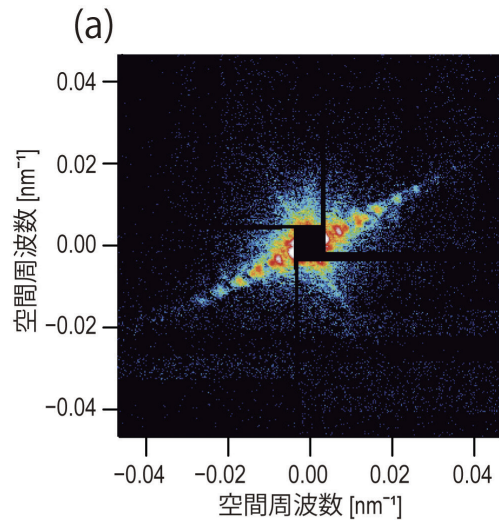


図2 (a)PCXSS 実験で測定された生きているマイクロバクテリアからのコヒーレント回折パターンと (b) その解析により得られたマイクロバクテリアの画像

チップに入れてスキャンすることで、自然な状態にある溶液試料を測定できる。西野教授らは、PCXSS 実験により *Microbacterium lacticum* のイメージング測定を行い、サブミクロンサイズの生きている細胞を可視化することに成功している(図2)^[7]。

壽壺号と MAXIC による実験は、ともに 1 μm 集光ビーム^[8]を利用して行われている。この集光ビームによる生物試料イメージング解析は、現状では、ミクロンサイズ程度の生体粒子を数十ナノメートル程度の解像度で行うのが適している。

3. SFX 実験データ解析の現状

SACLA における SFX は、先述の通り MAXIC を利用することも可能であるが、最近では DAPHNIS (Diverse Application Platform for Hard x-ray

diffraction In SACLA) が主に利用されている。DAPHNIS は、高輝度光科学研究センターの登野健介チームリーダーらにより開発された汎用実験システムで、試料チャンバ、液体インジェクタ、SWD-MPCCD 検出器^[9] など、コンパクトで取り換えが容易な機器群からなる。装置の組合せ次第では、生命科学から材料科学まで幅広い分野の様々な実験に対応可能である。

SFX の利用実験は、京都大学の岩田想教授がグループリーダーを兼務している理化学研究所の SACLA 利用技術開拓グループが主導して行っている。岩田グループは、SFX に適した試料調製法の開発も進めており、膜タンパク質の結晶化に有用な LCP (Lipidic Cubic Phase) の液体ノズルでの導入などが順調に立ちあがりつつあり、今後の成果創出が期待される。

SFX データの解析では、ドイツの DESY で開発された CrystFEL^[10] を利用して、指数付、強度積分が行われている。SFX では、SACLA が 30 Hz 運転時に、5分強で 1 万ショット、約 200 GB の回折パターンが取得される。施設では、このような大量データを CrystFEL により測定後、高速かつ自動で並列処理する仕組みの開発を進めている。

4. SACLA のデータ収集および解析環境の現状

4.1 データ収集システム

SACLA では、理化学研究所の初井宇記チームリーダーらにより開発された MPCCD 検出器^[11] を利用して画像データを取得する実験が主流である。CDI や SFX では、8 枚の MPCCD センサーを組み合わせたオクタル検出器が利用される。MPCCD センサー 1 枚で検出される回折データは「①センサーモジュール→②読み出しボード→③フレームグラバ

ボード→④バッファ用計算機→⑤書き込み用計算機→⑥キャッシュストレージ」の順に流れる (図3)。①にて X 線強度を電荷量に変換、②にて電荷量をデジタル信号に変換、③にてデジタル信号を計算機用のデータに変換、④にてデータをバッファ、⑤が④のデータを⑥に書き込む。センサー毎の分散データ収集により、最大 10 センサーを用いた場合でも、60 Hz の画像データ取得が可能システムとなっている。光強度測定用のフォトダイオードなどのデータ量が小さな各種モニター値は、リレーショナルデータベース MySQL を利用した同期収集データベース (DB) へ常時保存している。

保存されたデータは、ファイル内に階層構造を持つ HDF5 形式にて提供しており (SACLA run data format)、キャッシュストレージおよび DB から後述のデータ解析システムにダウンロードしてデータ処理することが可能である。SACLA run data format は、ショット ID、光源・実験・検出器情報を含み、高速なファイル読出・データ相関・高効率な大容量データハンドリングが可能である。

CDI や SFX では、XFEL パルスの試料へのヒット率が 50% 程度以下であることが多い。実験条件を効率よく最適化するためには、実験中にオンラインでヒット率を判定できることが望ましい。これまでに CDI と SFX 向けに、指定する領域 (ROI) の回折強度値を利用して、ヒットデータを高速にスクリーニングする Low-level Filtering 手法が開発され、データ収集システムに組み込まれている。回折データをキャッシュストレージに保存するのと並行して、ROI の回折強度値の統計量をバッファ用計算機で計算し同期収集 DB に保存する。Low-level Filtering GUI (図4) を利用し、DB に登録された ROI データを解析することで、ヒット率をオンラ

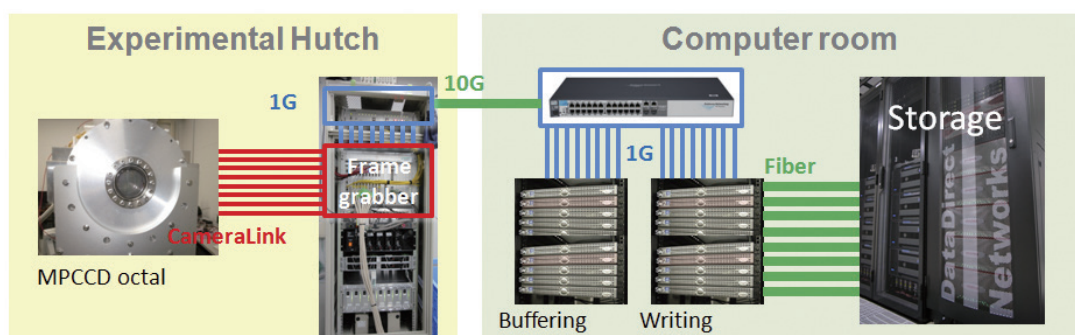


図3 MPCCD オクタル検出器の DAQ システム配線図
(高輝度光科学研究センター亀島敬研究員の好意により提供いただいた)

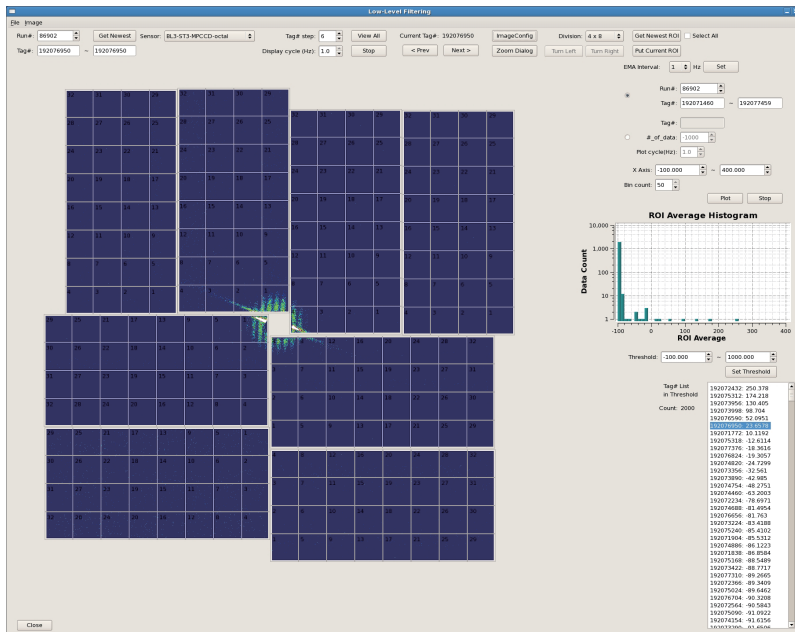


図4 ヒットデータを選別するための Low-level Filtering GUI とその検出例

インで判別することができる。ヒットデータのみをデータ解析システムにダウンロードすることが可能であり、Low-level Filtering 機能を利用することで高速に回折データを取得・処理することができる。

SACLA のデータ収集システムは、理化学研究所の制御情報グループが中心となり開発されている。

4.2 データ解析システム

SACLA では、データの1次解析用として約13 Tflops の計算能力をもつデータ解析システムをユーザーに提供している。このシステムは、計算ノード (12コア*80ノード=960コア)、大容量メモリ (1 TB) 計算機、データ転送用ノード、ログイン用計算ノードなどからなる。これら全てのノードが約 8 GB/sec で読み書きできる 170 TB の容量をもつ共有ファイルシステム (Lustre ファイルシステム) に接続しており、大容量のデータを高速アクセスして並列データ解析を行うことに最適化された構成となっている。また、長期保存用として、ディスクとテープの階層型ストレージシステム (容量約6 PB) をユーザーに提供している。

開発環境としては、Intel C/fortran などのプログラミング言語と Intel MKL などの数値計算ライブラリが利用可能である。また、数値計算、可視化、プログラミングのための高水準言語による対話型

の環境である MATLAB (4ライセンス) もユーザーに提供している。ジョブ実行環境としては、Torque/Maui システムを採用しており、ユーザーはこれを利用してデータ処理の負荷分散が容易に実現できる。

5. まとめと今後の展望

SACLA における CDI と SFX は、ともに順調に立ち上がり、その利用成果が出つつある。

生体粒子の CDI では、その解像度は、現状で数十ナノメートル程度である。今後、光源・ビームライン・実験手法の高度化により、数ナノメートル程度まで向上できると期待される。また、CDI の現状では、1つの回折パターンを位相回復計算により実

像に戻す2次元イメージングが主流である。今後は、複数2次元イメージの相関情報に基づく立体構造 (3次元) 解析へと発展していくと期待される。CDI で解析される2次元パターンは、フェムト秒オーダーの時間幅で切り取られた構造スナップショットである。SACLA の大量データの中には、同じ組成の粒子の異なる構造からのデータが当然含まれる。この大量データを生体粒子の“かたち”に基づき分類することができれば、3次元構造の動態を記述するべく、時間軸を含めた4次元イメージングが実現できる可能性もある。

XFEL パルスを利用した SFX では、X線照射損傷がない状態の生体分子の立体構造解析を原子分解能で行うことが可能である。アメリカの XFEL 施設 LCLS での SFX 実験^[2]が先行しているのが現状であるが、SACLA の SFX も急速に立ち上がりつつあり、生命機能を理解するのに重要な生体分子システムの新規構造解析が今後期待される。また SFX に、可視光レーザーで状態を励起するポンププローブ実験を組み合わせると、光化学反応を担う生体超分子の数10フェムト秒からピコ秒の時間スケールの時分割構造解析が可能である。

CDI や SFX で取得される膨大な実験データの解析では、スーパーコンピュータ「京」を含む HPC (High Performance Computing) との連携が重要

となってくる。SACLA では、データ解析システムに加えて、2014年3月末に約90 Tflops の計算能力をもつ「京」連携計算機システムの導入を予定している。「京」および「京」の関連技術により SACLA の利用研究が加速されることを期待したい。

参考文献

- [1] J. R. Fienup: *Appl. Opt.* **21** (1982) 2758.
- [2] S. Boutet, L. Lomb, G. J. Williams, T. R. M. Barends, A. Aquila *et al.*: *Science* **337** (2012) 362.
- [3] M. Nakasako, Y. Takayama, T. Oroguchi, Y. Sekiguchi, A. Kobayashi *et al.*: *Rev. Sci. Instrum.* **83** (2013) 093705.
- [4] C. Song, K. Tono, J. Park, T. Ebisu, S. Kim *et al.*: *J. Appl. Cryst.* **47** (2014) in press.
- [5] Y. Sekiguchi, T. Oroguchi, Y. Takayama and M. Nakasako: submitted.
- [6] Y. Takahashi, A. Suzuki, N. Zettsu, T. Oroguchi, Y. Takayama *et al.*: *Nano Lett.* **13** (2013) 6028.
- [7] T. Kimura, Y. Joti, A. Shibuya, C. Song, S. Kim *et al.*: *Nature Commun.* **5** (2014) 3052.
- [8] H. Yumoto, H. Mimura, T. Koyama, S. Matsuyama, K. Tono *et al.*: *Nature Photonics* **7** (2012) 43.
- [9] 高輝度光科学研究センターの亀島敬研究員らにより開発された広角側の回折光を測定するための検出器システム
- [10] T. A. White, R. A. Kirian, A. V. Martin, A. Aquila, K. Nass *et al.*: *J. Appl. Cryst.* **45** (2012) 335.
- [11] T. Kameshima, S. Ono, T. Kudo, K. Ozaki, Y. Kirihara *et al.*: submitted.

城地 保昌 *JOTI Yasumasa*

(公財)高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0992
e-mail : joti@spring8.or.jp

International Conference on Biology and Synchrotron Radiation (BSR2013) 会議報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用研究促進部門 長谷川 和也、星野 真人

はじめに

今回で第11回目となった International Conference on Biology and Synchrotron Radiation (BSR2013) が、2013年9月8日～11日の期間で、ドイツのハンブルグで開催された。日本はまだ残暑が厳しい9月の初旬であったが、ハンブルグは早くも秋の雰囲気であった。会議初日は、午前中こそ晴れ間が見えていたが、会議が始まる午後には天候は下り坂で、会期中はあまり好天に恵まれなかった。

会場となった Grand Elysee Hamburg ホテルは、市内の Dammtor 駅から徒歩数分であり、Dammtor 駅までは空港地下から出ている S バーンで30分程度とアクセスは良好であった。Dammtor 駅を挟んで反対側には、市庁舎やショッピングストアなどが軒を連ねており、ハンブルグの名所であるアルスター湖（川をせき止めて作ったという人工湖）までは、会場から徒歩15分程度の距離であった。アルスター湖では、遊覧船が周遊しており、天候が良ければ船上からハンブルグの街並みを眺めるのにはうってつけである。



夕暮れのアルスター湖

さて、今回の BSR では、オーラル発表はホテル施設である Grand Ballroom で行われた。パラレルセッションは行われず、すべてのオーラル発表がこ

の Grand Ballroom で行われた。各オーラルセッションは、招待講演と一般講演で構成され、装置開発や応用など、放射光を用いた Biology 研究についての講演が行われた。オーラル発表は全部で9つのセッションで構成され、セッションの最初に招待講演が行われ、続いて一般講演が行われた。各セッションのテーマは次の通りである。

Session1: Synchrotron Instrumentation

Session2: Biology sample preparation and characterization

Session3: Biology small angle X-ray scattering

Session4: Macromolecular X-ray crystallography

Session5: Biological X-ray imaging, and absorption

Session6: Application to medically relevant objects

Session7: Sources and methods development

Session8: Structural biology hybrid applications

Session9: Free Electron Laser applications in biology

筆者2人で、すべてのセッションおよび講演テーマについて触れることは不可能なので、以下では専門分野を中心に口頭発表に関する報告を行う。



オーラル発表会場（Grand Ballroom）の様子

まず、オープニングトークでは、ハンブルグに拠点を構える DESY の Jochen Schneider 氏によ

り、放射光を用いた構造生物学研究ということで、主に DESY キャンパスの概要や、PETRA-III の建設とその利用についての講演がなされた。また、近年その利用が開始されている世界各地の XFEL についても言及し、FLASH (Free Electron Laser in Hamburg) を始め、アメリカ・スタンフォードの The Linac Coherent Light Source (LCLS) などにおける構造生物学研究についての概説がなされた。

続くオーラルセッション I では、Synchrotron Instrumentation ということで、主に装置開発や構造生物ビームラインの現状などについて6件の講演が行われた。Diamond Light Source の G. Evans 氏からは、Diamond Light Source におけるタンパク質結晶構造解析ビームライン (MX ビームライン) の現状について報告がなされた。様々な結晶サイズに対応するため、ビームサイズは $8 \mu\text{m}^2$ から $50 \mu\text{m}^2$ まで可変であるということである。また、マイクロビームを生成するために、Compound refractive lens を用いていることが紹介された。微小結晶の測定では結晶の可視化が困難であることから、測定装置上の結晶の位置を探る目的で、X 線マイクロ CT を用いた位置決めも開発しているということである。

JASRI の八木直人からは、SPring-8 における高フラックスビームライン BL40XU における時分割小角散乱実験の現状についての報告がなされた。時分割計測を行う上での装置の工夫(高感度 X 線検出器、高速カメラ、蛍光体の残光特性など)について示された。また、時分割計測の応用として、小角散乱を用いた昆虫の筋肉の動きに関する研究例などが示され、試料のダイナミクスを研究する上で、高輝度放射光の存在は不可欠であることが示された。

その他、このセッションでは、フランス ESRF や中国 SSRF の MX ビームラインにおける、オートメーション測定やサンプルチェンジャーロボット、また測定試料のメールインサービスの現状について報告がなされた。

初日最後の講演は、理研の山本雅貴氏による講演であり、SPring-8 の BL32XU におけるタンパク結晶構造解析において、10 ミクロン以下のマイクロ結晶をターゲットとしたマイクロフォーカスビームラインの現状とアップグレード、および、微小結晶を扱うための結晶加工技術やハンドリング技術についての報告がなされた。

SAXS に関する口頭発表報告

今回の BSR の特徴のひとつは、オーラル・ポスターともに SAXS に関する発表が多かったことである。これは、SAXS の大家 Dmitri Svergun 先生のお膝元でもあり、また、本学会のオーガナイザーの一人であったことが大きいであろう。2日間あったポスター発表の初日は大半が SAXS 関連の講演であったように思う。オーラルでは、セッション 2: Biology sample preparation and characterization、セッション 3: Biological small angle X-ray scattering、セッション 6: Application to medically relevant object およびセッション 7: Source and methods development において SAXS の方法論・装置開発・利用に関する講演があった。ここでは、そのいくつかについて報告する。

EMBL Hamburg の Clement Blanchet 氏は PETRA-III SAXS beamline P12 について報告した。このビームラインでは、集光に Bimorph Mirror を使用し、ビームサイズ $200 \times 120 \mu\text{m}^2$ 、フォトンフラックスが 1×10^{13} (photons/s) で、エネルギー $4 \sim 20$ keV をカバーしている。また、寄生散乱の少ない Scatterless スリットを使用して低角分解能を精度良く測定できるようにしているということである。この講演で驚いたことは、SAXS 測定・解析の自動化が非常に進んでいることであった。サンプルチェンジャーの導入はもちろんのこと、Flight Tube と呼ばれるシステムを開発し、検出器の移動と真空パス長の変更を自動的に行っている。データ測定には独自開発した BECQUEREL (Beamline Experiment Control – QUEue and RELax) を使用し、自動化を実現している。また、データ解析ソフト ATSAS による解析を測定に連動させ、測定から解析までパイプライン化されたシステムを実現していた。また、これらを用いたりモート測定やメールイン測定も実施しているということであった。このような自動化、パイプライン化は、ビームラインの効率利用だけではなく、SAXS 利用への敷居が低くなり他分野からの利用増加にも貢献するであろう。

EMBL Hamburg の Melissa Graewert 氏は PETRA-III の SAXS ビームラインに導入している Malvern system について報告した。放射光の SAXS ビームラインでは、測定セルにサイズ排除クロマトグラフィー (SEC) を連結し、測定直前に単分散成分を分離して測定する方法が良く用いられる。このシステムでは、SEC の溶出液の UV 測定だ

けではなく、屈折率と静的光散乱を測定し、濃度以外に試料の分子量情報などの物理化学的性質が得られる。これにより、測定した試料の素性がより詳細に分かり SAXS データ解析の助けになるということであった。講演に対しては、測定に時間がかかり限られた時間が有効に利用できないのではという指摘があったが、スピードよりもより質の高いデータを得る方針で導入したということである。

Luebeck 大学の Manfred Roessle 氏は、SAXS の測定試料の準備を効率化する SAXS-CD について講演した。SAXS 測定では濃度の希釈系列や溶媒条件のスクリーニングなどのために多くの条件の試料準備が必要になる。SAXS-CD は、より少ないサンプル量で効率的に試料準備を行うために、Compact Disc (CD) のような形状をした円盤に微小水路を加工し、それを回転させることで遠心力で溶液の混合を行う仕組みである。また、そのまま SAXS の測定も可能であるということであった。

SAXS の利用例として以下の3件を紹介する。Copenhagen 大学の Pie Huda 氏は、SAXS を用いた NanoDisc の構造研究について講演した。NanoDisc は膜骨格タンパク質 (Membrane Scaffold Protein: MSP) で囲まれた脂質二重膜でその中に膜蛋白質を組み込むことが出来ることから、不安定な膜蛋白の研究に利用できると期待されている。本講演では、SAXS による構造研究に適した品質の NanoDisc の作成方法の開発と、その実例としてマグネシウムトランスポーターの SAXS による解析例について報告があった。

コーネル大学の Lois Pollack 氏は SAXS を用いた RNA のダイナミクス、分子間相互作用についての研究について講演した。時分割 SAXS、粒子間干渉測定、anomalous SAXS 法を用いることで、溶液中のイオンの濃度・価数が RNA のフォールディングにあたる影響や、RNA 周辺の1価、2価イオンの分布を明らかにした。SAXS のもつ特徴を目的に応じて使い分けることで、結晶解析法で得ることが困難な情報を得ている研究であった。

Basel 大学の Georg Schultz 氏は、Scanning SAXS 法を用いた脳組織中のナノ構造の研究について講演した。5×20 μm²のビームを用いて100 μm ステップで脳組織の切片を2次元スキャンし、ミエリンの分布や配向を決定した。蛍光顕微鏡では観察できないミエリンの配向を決めることができるのがメリットということであった。

Macromolecular crystallography に関する口頭発表報告

このセッションでは、タンパク質結晶構造解析ビームラインに関する講演が3件、タンパク質の結晶構造解析に関する講演が2件あった。

SOLEIL の Andrew Thompson 氏は、講演の前半で、平行ビームで多軸ゴニオメーターと PILATUS を実装する PROXIMA1 と、10×5 μm²のビームが利用可能な PROXIMA2 の2本のビームラインについて紹介した。ビームは非常に安定しておりその変動は、±15 μm/month, 1 μm/30 min であることを強調されていた。また、データ測定中に2 msec のインターバルで、6箇所仕込んだビームモニタをチェックしているとのことである。講演の後半は PIXEL 検出器と多軸ゴニオメーターを用いたデータ測定の話であった。この組み合わせは S-SAD 法のように非常に微弱なシングナルの測定が必要なときに有用であると述べていた。多軸ゴニオメーターを利用する際に測定条件を推奨するプログラムを Global Phasing LTD の G. Bricongne 氏と共同開発していること、また、多軸ゴニオメーターが他の機器に衝突するのを防ぐために Anti-collision のシステムも開発しているとのことである。

Lund 大学の Marjolein Thunnissen 氏は、MAX IV の MX ビームラインについて講演した。MAX IV はスウェーデンで建設の進んでいる加速エネルギー 3 GeV、周囲長 528 m、蓄積電流 500 mA の新しい放射光施設である。水平エミッタンスが 0.24 nm.rad で、PETRA-III を抜いて世界最小の低エミッタンスリングとなる。低エミッタンスを実現するために 7 bend achromat を採用しているということであった。この低エミッタンス光源を利用し MX ビームラインも2本計画されている。そのひとつは、BioMAX と呼ばれるビームラインで、ビームサイズ 10 ~ 100 μm、フォトンフラックス 2×10¹³ photons/sec の性能で、ハイスループットデータ測定を目的とし、2016年のユーザー利用をめざし計画が進んでいるということであった。もう1本のビームラインは MicroMAX と呼ばれるマイクロフォーカスビームラインである。最小 0.71×1 μm² で 2×10¹³ (photons/sec) を目指したビームラインで、BioMAX で測定できない微小サンプルをターゲットとする。このビームラインでは、XFEL で行われている Serial Crystallography も利用するというところである。また、ユニークなオプションとして、

フォトンフラックスが 10^{15} 台のピンクビームを利用できるようにするということである。先に述べたように MAX IV は低エミッタンスリングである。別のセッション（セッション7: Source and method development）では、ESRF の低エミッタンス化に向けた Phase II upgrade に関する講演があった。それによると 0.13 nm.rad の低エミッタンスを実現し、それを利用した $0.5 \times 0.1 \mu\text{m}^2$ 、 6×10^{14} (phs/s/ μm^2) の MX ビームラインを構想しているとのことである。SPring-8 でも次期計画において、これらを上回る低エミッタンス化を目指しているが、これを利用した MX ビームラインについてもその方向性を議論する時期であろう。

執筆者の一人、JASRI の長谷川和也は BL41XU の高度化について講演した。楕円ミラーを用いた2段集光を用いることで、ビームの微小化・高強度化を図り、サイズ $5 \mu\text{m} \sim 50 \mu\text{m}$ で、フォトンフラックス $1 \times 10^{13} \sim 5 \times 10^{13}$ (photons/s) を実現するということである。ビームサイズ変更は、仮想光源サイズの変更に加え、試料のデフォーカス位置への移動と、ミラーの傾き変更を組み合わせて行うということであった。これに対して、ビームサイズ変更に必要な時間、サイズ変更後のアライメント方法についての質問があった。MX ビームラインでは、1回のビームタイムに数 μm ～数百 μm の範囲でサイズの異なる結晶が持ち込まれることがあり、試料に応じて迅速にビームサイズを切り換えることが重要である。BL41XU のアプローチは、これまでに MX ビームラインで試されてこなかったことから注目されたのであろうと思われる。

このセッションの他の2講演は、Utrecht 大学の Piet Gros 氏によるほ乳類の補体にかかわるマルチドメインタンパク質の構造研究に関する講演と、Bach Institute of Biochemistry の Vladimir Popov 氏による高熱菌由来アルコール脱水素酵素の分子構造と熱安定性の関係についての研究に関する講演であった。タンパク質構造解析の講演が少なかったのが今回 BSR の印象である。このセッションでの上述2件の他は、Structural biology hybrid approach のセッションで電顕や SAXS を組み合わせた講演があっただけであり、SAXS に比べてやや寂しい感が否めなかった。

X線イメージングに関する口頭発表報告

招待講演である University of Melbourne の

Leann Tilley 氏からは、マラリアに感染した赤血球の X 線イメージングに関する講演がなされた。赤血球は大きさ数ミクロンの血液細胞であり、マラリアに感染するとその形状が大きく変化することが知られている。Tilley 氏の講演では、高分解能結像型軟 X 線顕微鏡やコヒーレント回折イメージング法を用いて、マラリア感染した赤血球の構造計測に関する報告がなされた。軟 X 線顕微鏡は、ウォータウィンドウ領域（波長 2.3 nm～4.4 nm）の軟 X 線を利用することで、含水もしくは凍結状態の試料を高い画像コントラストで計測することが可能であり、細胞のような含水微小有機物のイメージングに適している。Tilley 氏が利用した ALS の軟 X 線顕微鏡（National Center for X-ray Tomography）は、世界的にも珍しい軟 X 線を用いたナノトモグラフィーを専用とした装置であり、マラリア感染した赤血球を3次元で計測することが可能である。ナノトモグラフィーにおける3次元画像の空間分解能は 50 nm 程度で、観察可能な視野の直径は 10 ミクロンということである。一方で、コヒーレント回折イメージングは、APS で行っており、フレネルゾーンプレートをコヒーレント照明することによって得られる集光ビームにおいて、集光位置から少し下流側に試料を設置することにより、球面波により試料を照明し、回折パターンを取得する Fresnel Coherent Diffraction Imaging (FCDI) という手法を用いていることが紹介された。X 線エネルギー 2.5 keV で、空間分解能は 35 nm 程度とのことである。また、タイコグラフィーという手法を組み合わせることで、FCDI 画像の画質の向上や試料への低線量化が図れるということである。

同じく招待講演である Brookhaven National Laboratory の Lisa Miller 氏からは、放射光イメージングのアルツハイマー病の研究への応用についての講演がなされた。アルツハイマー病で発現するとされる金属イオン（鉄、銅、亜鉛）をバイオマーカーとすることで、それらを放射光イメージングで定量し、病気発現におけるそれらの役割を解明しようとするものである。アルツハイマー病を発現させた PSAPP マウスを用いて、放射光赤外スペクトロスコピーによる脂質過酸化反応（Lipid Peroxidation）や、蛍光 X 線顕微鏡による上記の金属イオンの定量に関する結果が紹介された。

Paul Scherrer Institut の Ana Diaz 氏からは、SLS における凍結細胞の X 線ナノトモグラフィー

についての取り組みが紹介された。Tilley 氏の講演でも用いられたタイコグラフィという手法を用いて、それを X 線ナノトモグラフィに 응용している。世界的に見ても、タイコグラフィは高分解能 X 線イメージングにおける新しいスタンダードになってきていることが伺える。なお Diaz 氏の講演では、これまでのスタンダードであったゾンプレートを用いた X 線顕微鏡における測定上の問題点（結像素子であるゾンプレートの焦点深度や効率等）についての指摘がなされた。彼らの中では、タイコグラフィを用いることで、一般的なコヒーレント回折イメージングと比べても大視野のイメージングが可能となることから、従来法に代わる高分解能 X 線イメージング法として位置付けられているようである。講演では、セルモデルとしてクラミドモナス（藻の一種）を用いて、開発手法の有用性について示された。3次元画像における空間分解能は 50 nm 程度だということである。なお、タイコグラフィを用いたナノトモグラフィによる試料の 3次元画像において、10 nm の空間分解能の達成を目標とした装置開発プロジェクト OMNY (tOMography Nano crYo stage) についても紹介された。

執筆者の一人、JASRI の星野真人からは、X 線位相差 CT を用いた定量イメージングに関する報告がなされた。前述の Tilley 氏や Diaz 氏は、細胞のような生体内でもミクロな器官を測定ターゲットとしていたのに対して、星野はよりマクロな試料を測定ターゲットとして、マウス胎児の全身イメージングを例に、3次元定量イメージングにおける X 線位相差 CT の有用性について報告がなされた。講演では、タルボ干渉計を用いた X 線位相差 CT を用いて、摘出直後のマウス胎児に应用することで、試料の 3次元密度分布を定量的に可視化するとともに、同一試料においてホルマリンによる固定前後の密度分布を比較することで、一般的に試料固定用に用いられる固定剤が生体試料の密度分布や試料形状変化に与える影響について示された。

University of California, San Francisco の Carolyn Larabell 氏からは、軟 X 線顕微鏡を用いた細胞核の 3次元イメージングに関する報告がなされた。講演では、Tilley 氏の研究でも使用されている ALS, National Center for X-ray Tomography で行われている細胞のナノトモグラフィに関して、様々な測定例とともに紹介された。ナノトモグラフィによって得られる 3次元画像の空間分解能

は 50 nm 程度であるということ、現状では Diaz 氏によって紹介されたタイコグラフィを用いた方法でも、ゾンプレートを用いた方法でも達成される空間分解能は同等のようである。装置自体は実用レベルであり、試料調整も含め測定手法として確立されている印象を受けた。一緒に参加した日本人研究者の中には、Larabell 氏が示した細胞の 3次元画像に感嘆する人もいた。

今回のイメージングに関する口頭発表のうち、ほとんどが細胞をターゲットとしたイメージングであり、マウスやラットのような実験動物を用いた Whole body イメージングに関する発表は、ポスター発表も含め数が少ないという印象を受けた。前回の BSR では、MASR (Medical Application of Synchrotron Radiation) との共同開催ということもあり、様々な計測手法や解析手法に関する講演が見られたが、今回は BSR 単独開催ということも要因の一つではないかと思われる。

XFEL の biology への応用について

会議最後のセッションでは XFEL の biology への応用に関する報告がなされた。Uppsala Universitet の Janos Hajdu 氏からは、XFEL を用いて 1 高分子からの回折を捉える試みが紹介された。XFEL の場合、その強度ゆえ、試料への放射線損傷が大きな問題となる。講演では、もちろんそのことについても触れられ、印象的だったフレーズが、“Speed of light vs. Speed of a shockwave” であり、試料が破壊される前に構造を反映した情報を取得するということである。また、コヒーレント回折イメージングを用いた 3次元イメージングの試みについても紹介された。試料自体は、1 度 X 線パルス照射すると破壊されてしまうので、3次元イメージングを行うためには、異なる試料から得られた 2次元回折データから、Self-consistent 3D データを作成して、それから 3次元の電子密度分布を再構成するということであった。また、XFEL とはいえ、X 線パルスをそのまま照射しただけでは 1 分子からの信号強度は非常に弱いため、信号強度を増やすために KB ミラーにより集光しているなど実際の計測を行う上での工夫も紹介された。

同様に DESY の Henry Chapman 氏からも、スタンフォードの LCLS におけるコヒーレント回折実験についての報告がなされた。こちらもコンセプトは、“Time is frozen with a short light pulse” であ

り、試料の放射線損傷は避けては通れないものとして、その上で様々な工夫をすることで、高分解能計測に応用しているようである。

SLAC の Keith Hodgson 氏や、European XFEL の Charlotte Utrecht 氏からは、XFEL のバイオメディカル研究に向けた装置改良について報告された。いかにして効率よく X 線パルスの光路上に試料を持っていくか (Delivery system) について、また試料からの信号を効率良く捉えるためにバックグラウンドを低く抑えるための試みについて報告された。

SLAC の Sebastien Boutet 氏は、スタンフォード LCLS において実際の利用実験に向けた施設側の取り組みについて報告された。例えば、XFEL を用いたコヒーレント回折イメージングにおける試料位置でのフラックス向上を目的とした KB ミラーによる X 線パルス集光や、XFEL 実験における限られたビームタイムを増やすことを目的とした Multiplexing オプションの開発などが紹介された。Multiplexing オプションでは、極薄シリコンやダイヤモンドから成るビームスプリッターを用いてビームを分割することで、同時に複数の実験に利用できるということである。

XFEL のセッションでは、XFEL を Biology へ応用する上での様々な問題点が指摘されたが、共通していることは、いかにして試料からの回折光を効率良く測定するかということ、またフラックスを上げるために集光ビームにした場合、X 線パルスの集光スポットに試料をいかに効率良く運ぶか、ということのようである。これらの問題を解決するために、講演では具体的な方法も示されており、次回の BSR ではより精度の高い計測結果が出てくるであろうと思われる。

おわりに

次回の BSR は、3年後の2016年にアメリカ・スタンフォードで行われるとのことである。会議中は、厚手の上着が手放せなかったが、日本に帰国するとまだ残暑が厳しく、この気温差はかなり体にこたえるものであった。

長谷川 和也 HASEGAWA Kazuya

(公財)高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0833
e-mail : kazuya@spring8.or.jp

星野 真人 HOSHINO Masato

(公財)高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0833
e-mail : hoshino@spring8.or.jp

14th International Conference on Accelerator and Large Experimental Physics Control Systems (ICALEPCS2013) 報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター
制御・情報部門 山下 明広

2013年10月7日から11日にわたって、米国サンフランシスコで開催された ICALEPCS 2013 (14th International Conference on Accelerator and Large Experimental Physics Control System) の報告をします。

ICALEPCS とは

ICALEPCS とはその名前のとおり、加速器と巨大物理実験の制御システムについての国際会議です。ここでの巨大物理実験は、核融合研究、素粒子検出器、電波、光学望遠鏡、重力波検出器などです。これらの巨大化、精密化する科学施設を運転するためには、制御システムが欠かせません。ICALEPCS は長年にわたって巨大科学施設の制御について、唯一の国際会議として成長してきました。

1983年に第1回がベルリンで開催されてから1年おきに欧、米、アジア・オセアニア地域を巡回して行われています。今回は米国の NIF (National Ignition Facility、国立点火施設) を持つローレンスリバモア研究所が主催しました。これまでの主催者は全て加速器施設でしたが、14回目の今回は加速器施設以外での初の開催ということになります。ローレンスリバモア研究所については後述いたします。

会議前ワークショップ

会期に先立って、いくつかのプレカンファレンスのワークショップが行われました。

SPring-8メンバーが参加したのは、Open Hardware Workshop CERNが主導している Open hardware についてのワークショップです。Open hardware はプロジェクト数、利用者数とも順調に拡大しています。

Motion Control Applications in Large Facilities Workshop

科学施設で使用されている主にモーターの制御について広い話題を取り上げたワークショップ。SPring-8でもビームラインを中心に多数のモーターが使用されているので、興味深いワークショップです。ステッピングモーターかサーボモーターか、カスタムの制御ハードウェアか市販の制御ハードウェアか、などの論争の一方、市販のハードウェアを使用した場合、そのサポート切れにどう対応すべきなのかなど、泥臭い話題が多岐にわたって話し合われました。

Control System Cyber Security for High Energy Physics Workshop

科学施設のコンピューターセキュリティについてのワークショップ。これももう4回目を迎えました。当初に比べて、制御系も含めたコンピューター／ネットワークセキュリティについて理解も深まり、前回まで大きな話題であったネットワーク攻撃の話題はありませんでした。

各研究所の現状報告がありました。ファイアウォールで区画された多層のネットワーク構成は、どこも似たようなものに落ち着いてきているようです。

リモートアクセスと認証について

多機関での共同研究が増加する現状において、ネットワークセキュリティを確保しつつ、外部の別機関のネットワークにアクセスしたいという相反する要求を満たすのは技術的になかなか難しいことです。SPring-8の杉本が、所外からの加速器／ビームラインネットワークへの安全なアクセスを許す WARCS2システムについて話した他、役割ごとに細かいアクセスを許可するシステムが紹介されまし

た。

TANGO Workshop ESRF が中心となって、開発が続けられている制御フレームワークの TANGO のワークショップ。TANGO は主にヨーロッパの放射光施設で広く使われています。

会場

会場は、サンフランシスコのダウンタウンのビジネス街にあるハイアットリージェンシーサンフランシスコホテルでした。

2013年10月といえば、アメリカ政府のシャットダウンが大きな話題になっていました。主催者をはじめ、参加者にはアメリカの国立研究所のメンバーも多く、部外者としては心配でしたが、実際は何の問題も感じられませんでした。アメリカの加速器関係の国立研究所が政府直営でなかったことが幸いでした。

会議はホテルの宴会場で行われ、ポスター会場もその周辺でコンパクトにまとまっていました。会議場の広さは十分にあり、参加者の前にテーブルが置かれメモを取るには最適でした。ところが天井が低く大画面のスクリーンが設置できない構造のため、苦肉の策としてスクリーンを左右2画面で同時表示させざるを得なくなっていました。

そのため、レーザーポインタを使う発表者はどちらのスクリーンを指示しようか戸惑うことになってしまいました。大会場ではレーザーポインタを使わないプレゼンテーションをすべきであるという日頃の筆者の持論が、またもや証明されました。読者の皆様にもこのことを強調したいと思います。

参加者、プレゼンテーション全般

参加者は全部で610名、そのうち530名が一般参加者。他が企業、学生などです。

プレゼンテーション全般の印象として、今回の会議でも準備不足と思わせるものが多々あったことは残念です。しゃべりの下手は論外としても、一度仲間にレビューしてもらえば有り得ないだろうというような小さい字で書いてくる者など、少しのリハーサルの手間を惜しんだために研究の内容が理解できない、研究の価値が低く見られてしまうものが散見されたことは非常に残念なことです。また一般発表者ではなく基調講演でしたが、下手な TED (Technology Entertainment Design) 風のプレゼンテーションって本当に悲惨ですね。読者の皆様の

中にも TED 風プレゼンテーションに憧れる方もいらっしゃると思いますが、相当ガンバラないといけないという感想を持ちました。

SPring-8の2人の口頭発表者は、わずか3回しか仲間内のリハーサルができませんでしたが、合格点レベルの発表ができたことを報告しておきます。

セッション構成

下記の14セッションのうち一部パラレルで行われました。

- ・プロジェクトの現状報告
- ・プロジェクト管理と協力関係
- ・複雑で多様なシステムの統合
- ・知識ベースシステム
- ・人的安全と機械保護
- ・ハードウェア技術
- ・タイミングシステムと同期
- ・ソフトウェア技術の進歩
- ・実験制御
- ・フィードバックシステム
- ・ユーザーインターフェイスとそのツール
- ・データ管理と処理
- ・制御システムインフラ
- ・制御システムのアップグレード

回を追うごとにセッションにも変化が見られます。前回と同数の14セッションが設けられましたが、4セッションで入れ替えがありました。前回のものより具体的なものが多いという印象です。抽象的なセッション名での発表はチェアの意図がよく伝わらず、内容がフォーカスされていないものが多いと感じました。

発表と印象

筆者はハードウェアというよりソフトウェア寄りなので偏りが出るかもしれませんが、そのつもりでお読みください。

ソフトウェア、インターネット発祥技術の応用

現在の世界のソフトウェア開発を牽引するのは、何とんでもインターネット関連の技術であることに異論は無いです。今回はインターネット発の技術を制御に応用した発表が目立ちました。Websocket というブラウザとサーバーを高速に通

信する技術を使用して、ブラウザ内でリアルタイム性を高めたユーザーインターフェイスの発表がいくつかあったのは予想通りでした。

リレーショナルデータベースを使わない NoSQL (Not only SQL) を使用したデータ蓄積システムも SPring-8 を含めていくつも出始めました。いずれも大量のログデータの蓄積にリレーショナルデータベースに変わり、NoSQL を使用しているところが共通です。今まで使用されてきたリレーショナルデータベースは性能面、スケーラビリティの面で NoSQL に及ばないことが明らかになってきたというのが世界的な合意だと思われます。

SPring-8 では、新データ蓄積システムとしてコラム指向データベースである Apache Cassandra を使用し始めていますが、他に Hbase やドキュメント指向データベースである MongoDB を使用したシステムが発表されていました。新技術の出始めにはこのように様々なシステムが乱立し、いずれ少数に統一されるのが常です。制御における NoSQL も、やっと乱立時代が始まったと言っていいかもしれません。

通信のミドルウェアにも転換が訪れているようです。10 年ほど前までは分散オブジェクト指向ミドルウェアである CORBA が全盛で、それを使用した制御システムも花盛りでした (TANGO, NIF の制御システム)。しかし、その複雑さとパフォーマンスの悪さから、よりシンプルで高速なメッセージを中心としてミドルウェアを採用する動きが見えてきました。ミドルウェアとして ZeroMQ (Tango, SPring-8, CERN で採用) のほか、AMQP (Advanced Messaging Queuing Protocol) の実装である RabbitMQ や JAVA messaging の ActiveMQ を採用したシステムなどです。

また複雑なデータ構造を通信するため、それを一旦文字列に変換することをジリアリゼーションと呼びますが、その方式についても Google が開発した Protocol buffer の人気がありました。MADOCALII では別の MessagePack というシステムを使用しているので、ポスター発表の時にはそれについての優劣を議論できたのは有益でした。

その他インターネット界で話題になっているビッグデータについても、X 線 CCD からの画像データを hadoop の map reduce で解析して HDF5 ファイルに落とすという発表が興味深かったです。

クラウド利用について印象に残る発表は、特にあ

りませんでした。ただ、NoSQL のデータベースのスケーラビリティを測定するのに、自前の計算機ではなく Amazon の AWS を借りてテストした例がありました。システムのスケーラビリティをテストするために、自前で事前にハードウェアを揃えるのが難しいことが多いのですが、そのような時に有効だと思いました。

ハードウェア

ハードウェア部門では、ポスト VME の組込み用のモジュールの規格は定まっていないという印象があります。画像データなど高速大容量な処理が必要な時に何をを使うか。ヨーロッパを中心に MTCA.4 の採用がありますが、他にも PCI Express などもあり、外側の規格はともかく、中のシステムは FMC (FPGA Mezzanine Card) 開発してしまう流れが見てとれました。

FPGA は完全に一般のハードウェアの要素になっています。10 マイクロ秒以下の反応が必要なときは FPGA、それより遅いときは CPU の棲み分けも一般的といえるようです。

人的保護と機器保護で印象的だったのは、SLAC の二重安全システムの今後についてでした。SLAC では別のプログラマチームが書いた 2 重のシステムを使うという航空機 (この場合は 3 重だったかも) のような方法をとっていました。ところがシステムの煩雑化のため、かえって信頼性が損なわれそうだという考えが出てきて、単純化する方向に移行するようです。

基調講演 (キーノート)

2009 年、我々が主催した時には一般発表者を中心に置き、キーノートは最小限に抑えましたが、今回に続き今回も多数のキーノートが行われました。毎日、最初はキーノートスピーチが行われ、NIF の現状がその所長から、火星探査機 Curiosity についての JPL 所長の話などがありました。両方ともアメリカの大研究所の所長ともなるとさすがに慣れておられ、実にわかりやすく興味深いプレゼンテーションでした。

他に興味深かったのは GNU Radio プロジェクトの話でした。これはソフトウェアラジオを GNU オープンソースで実現するプロジェクトです。ソフトウェアラジオは、従来高周波のアナログ回路で行われていた信号処理を FPGA などの上でデジタルで、

ソフトウェアで行うことで1つのハードウェアを変更することなくさまざまな通信方式、たとえばワンセグとかCDMA、LTEなどを実現してしまう技術です。GNU Radioの標準ハードウェアはとても安価で加速器の高周波回路には使えないかもしれませんが、ソフトウェアは応用が効くかもしれないと思われました。

サイトツアー、ローレンスリバモア研究所国立点火施設

主催のローレンスリバモア研究所は核兵器研究所として開設された研究所ですが、近年はレーザー核融合のためのNIFを建設し、その縁でICALEPCSコミュニティに参加してきました。NIFは2年ほど前に完成しましたが、会議が始まるほんの1週間前に科学的ブレイクイーブン（吸収されたレーザーエネルギーより核融合により放出されたエネルギーが上回る、NIFの造語らしい）をようやく達成したことをEd Moses所長が意気揚々と話していました。

会期の半日を使ってサイトツアーがありました。さすがに兵器研究所はセキュリティが厳しく、今までに無い経験をしました。まず、カンファレンス会場からバスに乗る時点でカメラは没収。携帯電話での撮影も禁止。研究所に着いてからも2度のパスポートチェックがあった後に、やっとNIFの見学ができました。

NIFは、192本の高出力レーザーを小さなターゲットに集中させて核融合を起すことを目的とした施設です。フットボールグラウンドサイズの建物に、レーザー装置がぎっしり詰まっています。研究所の写真は撮れませんでした。興味のある方は、この前公開された映画「スタートレック イントゥダークネス」をご覧ください。NIFの心臓部のターゲットチェンバーが、エンタープライズ号のワープエンジンとして登場しています。

ICALEPCS Lifetime Achievement 表彰

バンケット会場ではSPring-8の田中良太郎、黒川 真一 KEK 名誉教授の他4名が、長年にわたる制御の分野における貢献とICALEPCSへの寄与によって2013 ICALEPCS Lifetime Achievement Awardを表彰されました。

今回の会議はAustralian Synchrotronが主催し、メルボルンで行われることが前回発表されました。また、最終日に次々回の会場がスペインのバ

ルセロナで行われることが発表されました。主催者はALBAシンクロトロンを運営するConsortium for the Exploitation of the Synchrotron Light Laboratory (CELLS)です。

今回の会議には、SPring-8 制御・情報部門から田中、古川、松本、佐治、籠、清道、杉本、山下（筆者）が参加し、松本、佐治が口頭発表を行いました。

このレポートを執筆するにあたり、これらの方々から参考になるご意見を多くいただいたことを感謝いたします。

山下 明広 YAMASHITA Akihiro

(公財)高輝度光科学研究センター 制御・情報部門
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1
TEL: 0791-58-0945
e-mail: aki@spring8.or.jp

第6回 SPring-8 萌芽的研究アワード/ 萌芽的研究支援ワークショップ報告

SPring-8 萌芽的研究アワード審査委員会
委員長 高田 昌樹

1. はじめに

SPring-8は、これまで、多彩な研究分野にわたって利用されてきました。そして、その研究分野の数だけ、放射光科学とクロスオーバーした先端的な研究領域が創成されてきました。しかし、光源性能の進化に伴う応用分野の展開は、ますます加速しています。そのため、放射光科学の応用分野は、大学の既設のカリキュラムでの人材教育は追いつかず、On the Research Training (ORT) による自立的な人材を育成する場が求められています。そこで、SPring-8では、平成17年度より、放射光科学研究の独創的な展開を担う人材育成を支援することを目的として、「萌芽的研究支援プログラム」を実施しています。本プログラムは、一般課題と同じ基準による課題審査に基づき、大学院生が実験責任者として主体的にSPring-8を利用した研究遂行を支援する内容となっています。また、研究支援ワークショップやアワードなどを設け、成果発表までの方向性を議論する場も設け、SPring-8の利用を通して、一人前の研究者への成長を促すよう、プログラムされており、ひとつの特色となっています。

開始以来、7年にわたり約340課題が実施され、質・量ともに、学位取得に関わるレベルの高い成果発表が行われてきた萌芽的研究支援プログラムは、これまで2度にわたって行われた外部有識者による評価^{*1}でも、大学院生が研究者になるための主体的な能力開発に取り組む姿勢を積極的にサポートする意義深いプログラムであるとの高い評価を受けました。また、さらに若い学生の研究に対する自立性を支援するよう提言を受け、平成24年度(2012A期)より、実験責任者の応募資格をこれまでの博士後期課程から博士前期(修士)課程まで引き下げ、応募相談窓口となる大学教授によるコンサルタントを設置し、SPring-8利用に対するアドバイスをもらうことで、本プログラムの利用のメリットを的確に把握できるよ

う、支援の拡大と充実を図ってきました。

平成20年度に設置された、「SPring-8萌芽的研究アワード」は、その一環であり、本プログラムを活用して優秀な成果を上げた学生(当時)を表彰し、奨励してきました。また、アワード審査の口頭発表に合わせて、様々な研究分野にわたる萌芽的研究支援課題の成果発表ポスターセッションを企画する「萌芽的研究支援ワークショップ」を開催し、SPring-8がカバーする多様な利用研究に触れてもらい、幅広い視野と価値観を持った研究者としての成長を促すことを支援しています。

第6回を迎えたSPring-8萌芽的研究アワードは、2011A期から2012B期に実施された99課題を対象に、第一次審査として応募書類審査を行い、後述のとおり12月6日に開催されたワークショップにおいて口頭発表による第二次審査を行い、審査の結果、以下のとおり受賞者を選出しました。

第6回 SPring-8 萌芽的研究アワード 受賞者

江原 祥隆

(東京工業大学 総合理工学研究科)

「NEMS 用圧電体膜のナノドメインスイッチング
のナノ秒での高速応答の測定」

吉村 寿紘

(東京大学大学院 新領域創成科学研究科)

「生物骨格による気候復元の高精度化に向けた軟
X線 μ -XAFS法による微量元素の高分解能マッ
ピングと化学状態の解明」

2. 萌芽的研究アワード審査

SPring-8萌芽的研究アワードの審査基準は以下の3つの項目で、最大2名が、アワードに選ばれます。

- ①研究テーマの新規性・独創性・発展性
- ②研究成果におけるSPring-8の有効性
- ③実施体制における主体性

*1 http://www.spring8.or.jp/ja/about_us/committees/reports/bud_res_sup_report/

第一次審査（書類審査）および第二次審査（口頭発表：発表時間20分、質疑応答10分）ともに、SPring-8萌芽的研究アワード審査委員会の審査委員7名が、それぞれの審査基準について5段階評価を行い、集計結果をもとに合議により受賞者を決定しました。

第一次審査で選出された、アワード受賞候補者5名の研究成果発表（第二次審査）は、物質科学、材料科学、環境科学など広い研究分野にわたるテーマで、X線回折、XAFS、時分割、軟X線吸収分光など多彩な研究手法を用いた内容でした。発表はSPring-8の特性を活かすための独自の工夫を凝らした研究プロセスについて紹介され、それがチャレンジングなテーマの遂行にどのように効果的であったかという情熱的な議論から、実験成果を根気よく積み上げて取り組み、最後の結論を導き出したものまで、学生の多様な個性が発揮されたものとなりました。

審査は、人材育成の観点からディスカッションを重視し、専門分野の異なる学界・産業界の審査委員からの多角的な質問に対しても、明確な議論が展開されるなど、本プログラムの趣旨が成果を上げつつあることがうかがえました。

なお、今後の研究活動へのアドバイスとして、アワード応募者全員に、審査委員の審査コメントをフィードバックし、本プログラムがORTの役割の

一助となるよう配慮しております。

3. 萌芽的研究支援ワークショップ/ポスターセッション

アワード審査に合わせて開催されたワークショップには、約30名の参加があり、ポスターセッションによる活発な議論が行われました。

2012A期から課題応募資格を拡大したことにより、発表者数とともに発表者の学年幅が広がり、修士課程2年からポスドクまで10名の発表がありました。発表者らは審査委員や専門分野の異なる他の参加者と交流することができました。

4. おわりに

萌芽的研究アワードは回を重ねるごとに、研究テーマの応募分野はますます広がり、プレゼンテーションの技術も向上してきました。そのため、審査員の先生方からも、書類審査、口頭発表のいずれも、審査による発表者の順位付けも、年々難しくなってきたとの嬉しい悲鳴が聞こえてきます。今回、残念ながらアワード受賞に該当しなかった方々も、受賞者と優劣付け難い研究成果を発表されています。これまでの応募者の多くが、学位取得、及び企業、大学、公的研究機関でのポスト獲得にも成功されています。これらのことは、この萌芽的研究支援プログラムの趣旨がユーザーに着実に根付き、目標としている一定の成果を挙げて



いることの現れと言えます。

土肥理事長の挨拶にもありましたように、若い研究者達が、このプログラムでの成果をもとに、世界へ羽ばたき、各国の研究者として切磋琢磨し、SPring-8の次を切り拓く、国際的な研究者として活躍する日は、そう遠くないと確信しております。

今回のアワード受賞者は、昨年度の受賞者とともに、3月7日に大阪で開催が予定されているSPring-8コンファレンス2014*2において表彰され、受賞講演を行う予定です。また、ワークショップで発表されたすべての研究成果は、コンファレンスにてポスター展示される予定です。萌芽的研究が、学術、産業界の研究者の目に触れ、新たな研究交流の場となる事、そして、さらに次の世代の学生の本プログラムへの応募をエンカレッジする機会となることを期待しております。

本支援プログラムは、平成25年度に実施された国の大型放射光施設 (SPring-8) 中間評価*3においても、多くの若手研究者の育成に貢献したと高い評価を得ております。人材育成のさらなる充実を図るため、今後も大学・大学院との連携・協力のもと、一層の支援の改善、拡充に努めていく所存でございます。大学・大学院の指導教員の先生方にも、萌芽的研究支援課題への学生の応募を奨励下さるよう、ご協力をお願いいたします。

○アワード受賞候補者研究タイトル一覧

1. 「2回らせんに基づく有機結晶のキラリティ特性解明と結晶構造制御」
佐々木 俊之 (大阪大学大学院 工学研究科)
2. 「放射光 X 線回折による FeNi 規則合金の構造解析および磁気異方性との関係」
小嶋 隆幸 (東北大学 金属材料研究所)
3. 「NEMS 用圧電体膜のナノドメインスイッチングのナノ秒での高速応答の測定」
江原 祥隆 (東京工業大学 総合理工学研究科)
4. 「生物骨格による気候復元の高精度化に向けた軟 X 線 μ -XAFS 法による微量元素の高分解能マッピングと化学状態の解明」
吉村 寿紘 (東京大学大学院 新領域創成科学研究科)
5. 「二次元光電子分光法による酸化物半導体/絶縁膜界面の構造解析と欠陥評価」
上岡 義弘 (奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科)

○ポスター発表研究タイトル一覧 (アワード受賞候補者重複分を除く)

1. 「赤外顕微分光を用いた $\text{LaCo}_{1-x}\text{Rh}_x\text{O}_3$ の Co^{3+} のスピン状態」
浅井 晋一郎 (名古屋大学 理学研究科)
2. 「メカノケミカル調製した Pd 含有 La-Fe 系ペロブスカイト型酸化物の Pd K, L_{3} -edge による XAFS 分析」
内山 智貴 (九州大学大学院 総合理工学府)
3. 「コリンホスフェイト基を有する Calix[4]arene 系ミセルの構造解析と生体膜との相互作用評価」
藤井 翔太 (九州大学 工学府 物質創造工学専攻)
4. 「蛋白質結晶中に創り出した隙間を利用して分子の動きを観るための新しい X 線結晶解析」
松岡 礼 (九州大学 生体防御医学研究所)
5. 「超分子 Calix[4]arene の SAXS 構造解析」
坂本 俊介 (北九州市立大学 国際環境工学研究科)

○萌芽的研究アワード審査委員会

- 委員長 高田 昌樹 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門長
- 委員 岡田 明彦 住友化学株式会社 先端材料探索研究所 材料物性科学グループ 研究グループマネージャー
- 委員 上村みどり 帝人ファーマ株式会社 生物医学総合研究所 課長
- 委員 栗原 和枝 国立大学法人東北大学 原子分子材料科学高等研究機構および多元物質科学研究所 教授
- 委員 鈴木 謙爾 公益財団法人特殊無機材料研究所 代表理事
- 委員 鈴木 昌世 公益財団法人高輝度光科学研究センター 研究調整部長
- 委員 八木 直人 公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 コーディネーター

高田 昌樹 TAKATA Masaki

(公財)高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1
TEL : 0791-58-2750
e-mail : takatama@spring8.or.jp

*2 <http://www.spring8.or.jp/ja/science/meetings/2014/140307/>

*3 http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu17/houkoku/1342511.htm

2012A 期 採択長期利用課題の中間評価について

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用業務部

第46回 SPring-8利用研究課題審査委員会長期利用分科会（平成25年10月）において、2012A 期に採択された1件の長期利用課題の中間評価が行われました。

長期利用課題の中間評価は、実験開始から1年半が経過した課題の実験責任者が成果報告を行い、長期利用分科会が、対象課題の3年目の実験を実施するかどうかの判断を行うものです。以下に対象課題の評価結果および評価コメントを示します。

課題名	Development of Spin-HAXPES technique for the Exploration of the Electronic structure of Buried layers and Interfaces
実験責任者(所属)	Claudia Felser (Max Planck Institute of chemical physics of solids)
採択時の課題番号	2012A0043
利用ビームライン	BL47XU
評価結果	3年目を実施する

〔評価コメント〕

The aim of this long-term proposal is to develop spin polarized high-resolution hard x-ray photoemission spectroscopy (SPIN-HAXPES) technique, which is expected to play an essential role in investigating materials concerning spintronics devices. The review committee agrees that this bulk-sensitive spin-resolved technique is essential to investigate electronic and magnetic structures of buried layers and interfaces of such devices and appreciates the potential impact on the field. The committee appreciates also the HAXPES results, as well as new developments such as in-operand HAXPES, obtained by the group in 2012A and B. The committee, however, has a great concern about the significant delay of the main part of the project i.e., “SPIN”-HAXPES. In 2012A and B, the group faced the problems of a broken power supply and a broken detector and as a result they

could not perform the planned spin-resolved experiments. In 2013A, the group succeeded to make the overall system (Scienta analyser + SPLEED-type spin detector) work, but found extremely low counts and consequently could not observe spin-resolved signals. The construction of the 2D detection system is also delaying significantly. Although the committee concludes that it is appropriate to give another year for this long-term project, noting the significance and importance of the realization of SPIN-HAXPES, the committee strongly requests to the group to prepare the experiments carefully, testing the power supply, the lens system, and the detectors prior to each beam time. Also the committee requests the group to estimate the count rates of the spin-resolved signals based on the cross sections, available photon numbers, estimated transmission and detection efficiency for the entire system, and define the most reasonable photon energy for bulk-sensitive SPIN-HAXPES.

〔成果リスト〕

(査読付)

[1] SPring-8 publication ID = 23225

S. Ouardi, T. Kubota, G. H. Fecher, R. Stinshoff, S. Mizukami, T. Miyazaki, E. Ikenaga and C. Felser: “Stoichiometry Dependent Phase Transition in Mn-Co-Ga-based Thin Films: From Cubic in-plane, Soft Magnetized to Tetragonal Perpendicular, Hard Magnetized” *Applied Physics Letters* **101** (2012) 242406.

[2] SPring-8 publication ID = 24784

R. Shan, S. Ouardi, G. H. Fecher, L. Gao, A. Kellock, K. P. Roche, M. G. Samant, C. E. Vidal Barbosa, E. Ikenaga, C. Felser and S. S. Parkin: “Electronic and crystalline structures of zero band-gap LuPdBi thin films grown epitaxially on MgO(100)” *Applied Physics Letters* **102** (2013) 172401.

[3] SPring-8 publication ID = 25119

C. E. Viol Barbosa, S. Ouardi, G. H. Fecher, D. Ebke and C. Felser: "Magnetic dichroism in angular resolved hard X-ray photoelectron spectroscopy from buried magnetic layers" *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **189** (2013) 146-151.

2010A 期 採択長期利用課題の事後評価について

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用業務部

2010A 期に採択された長期利用課題について、2012B 期に3年間の実施期間が終了したことを受け、第46回 SPring-8 利用研究課題審査委員会長期利用分科会（平成25年10月）による事後評価が行われました。

事後評価は、長期利用分科会が実験責任者に対しヒアリングを行った後、評価を行うという形式で実施し、SPring-8 利用研究課題審査委員会で評価結果を取りまとめました。以下に評価を受けた課題の評価結果を示します。研究内容については本誌7ページの「最近の研究から」に実験責任者による紹介記事を掲載しています。

課題名	次世代光ストレージ開発のための相変化微粒子材料のピンポイント構造計測
実験責任者(所属)	山田 昇(京都大学)
採択時課題番号	2010A0030
ビームライン	BL40XU
利用期間/配分総シフト	2010A~2012B/216シフト

〔評価結果〕

本長期利用課題は、ハードディスクドライブ(HDD)と相補的に利用される相変化光ディスクの実用化をめざし、高速・高密度記録用ナノ構造体の作製とその相変化過程を計測することで、高速・高密度記録の原理検証を行う事を目標としている。

急速に増大するデジタルデータの記録システムとして、長期保存、省エネルギー、低コストの観点から、HDDと相補的に光ディスクを活用するシステムが期待されている。一方で、光ディスクの活用には、読み書き速度、容量に課題が残されていた。本長期利用課題では、この問題を解決する新しいデバイス構造を提案し、その有効性を放射光ピンポイント構造計測で実証した。課題は、1) デバイス構造の設計・作製、2) 検証のための放射光ピンポイント構造計測システムの最適化、3) 放射光ピンポイ

ント構造計測による原理検証で構成されている。

デバイス構造の設計・作製では、現在の光ディスクの課題である読み書き速度、容量を改善するナノドット構造を提案した。シミュレーションによって、20 nm ナノドット構造体が実用デバイスとしての仕様を満たすことを確認し、ナノ構造体の作製に成功した。原理検証実験には $\text{Ge}_{10}\text{Sb}_{90}$ の組成の 50 nm サイズのナノ構造体を作製した。

放射光ピンポイント構造計測システムの構築では、実デバイス相当の励起パルスレーザー光源、高強度ピンクビームの活用、パルスセクターによるバンチの選択的利用、レーザー変位計を用いた試料位置精密制御を実現し、これら要素技術のシステム化、最適化を行った。

原理検証実験では、300 ps の励起レーザー光照射によって、約 70 ns の遅延後に、15~20 ns の短時間で相変化することを確認した。実デバイスのディスク回転速度、ナノ構造体の記録サイズを考慮して実験結果を評価した結果、現行光ディスクで問題となっている書き込み速度、容量の問題が解決されることを明らかにした。

以上のように、本長期利用課題は、SPring-8 で開発されたピンポイント計測基盤をデバイス開発の評価装置として最適化し、新しい光ディスクの有効性を原理検証したもので、非常に高く評価される。今後、SPring-8 の多様なバンチモードや XFEL の短パルス光を用いた構造ダイナミクス解析による現象理解の深化が期待される。

〔成果リスト〕

(査読有)

[1] SPring-8 publication ID = 21503

K. Ohara, L. Temieitner, K. Sugimoto, S. Kohara, T. Matsunaga, L. Pusztai, M. Itou, H. Ohsumi, R. Kojima, N. Yamada, T. Usuki, A. Fujiwara and M. Takata: "The Roles of the Ge-Te Core Network

and the Sb-Te Pseudo Network During Rapid Nucleation-Dominated Crystallization of Amorphous $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ ” *Advanced Functional Materials* **22** (2012) 2251–2257.

[2] SPring-8 publication ID = 25202

T. Matsunaga, R. Kojima, N. Yamada, Y. Kubota and K. Kifune: “Structural transformation of Sb-based high-speed phase-change material” *Acta Crystallographica Section B* **68** (2012) 559–570.

[3] SPring-8 publication ID = 23877

N. Yasuda, Y. Fukuyama, S. Kimura, K. Ito, Y. Tanaka, H. Osawa, T. Matsunaga, R. Kojima, K. Hisada, A. Tsuchino, M. Birukawa, N. Yamada, K. Sekiguchi, K. Fujiie, O. Kawakubo and M. Takata: “System of laser pump and synchrotron radiation probe microdiffraction to investigate optical recording process” *Review of Scientific Instruments* **84** (2013) 063902.

[4] SPring-8 publication ID = 25201

N. Yamada, R. Kojima, K. Hisada, T. Mihara, A. Tsuchino, N. Fujinoki, M. Birukawa, T. Matsunaga, N. Yasuda, Y. Fukuyama, K. Ito, Y. Tanaka, S. Kimura and M. Takata: “Phase-Change Nanodot Material for an Optical Memory” *Advanced Optical Materials* **1** (2013) 820–826.

2010B 期 採択長期利用課題の事後評価について

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用業務部

2010B 期に採択された長期利用課題について、2013A 期に3年間の実施期間が終了したことを受け、SPring-8 利用研究課題審査委員会長期利用分科会による事後評価が行われました。

事後評価は、長期利用分科会が実験責任者に対しヒアリングを行った後、評価を行うという形式で実施し、SPring-8 利用研究課題審査委員会で評価結果を取りまとめますが、当該課題の実験責任者は、同一研究テーマの課題を2013B 期からの長期利用課題として新たに申請したため、その面接審査と同時に最終期（2013A 期）終了前に当該課題のヒアリングを第45回長期利用分科会（平成25年7月）において行いました。その後、当該課題の最終期（2013A 期）が終了後、実験責任者より改めて提出された、全期間の研究成果をまとめた最終版の「長期利用課題終了報告書」およびヒアリングの結果を踏まえ、長期利用分科会による最終的な評価結果がとりまとめられました。

以下に評価を受けた課題の評価結果を示します。研究内容については本誌12ページの「最近の研究から」に実験責任者による紹介記事を掲載しています。

課題名	Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) of Iron-Based Enzymes for Hydrogen Metabolism, Nitrogen Fixation, Small Molecule Sensing, DNA Repair, Photosynthesis, and Iron Storage
実験責任者(所属)	Stephen P. Cramer (University of California - Davis)
採択時課題番号	2010B0032
ビームライン	BL09XU
利用期間/配分総シフト	2010B~2013A/216シフト

〔評価結果〕

The principal investigator (PI) developed the technique of NRVS (Nuclear Resonance Vibrational

Spectroscopy) at beamline BL09XU and has applied it to the dynamics of iron atoms and the reaction processes in metalloproteins. SPring-8 was featured on the cover of *Angewante Chemie* in which a recent paper on [NiFe] hydrogenase from the PI's group was published. Several papers have been published in *Journal of American Chemical Society*. Also, this technique is employed by other groups and leading to several distinguished papers in high-impact journals. Thus, the contribution of the PI to SPring-8 and the protein science should be highly appreciated.

〔成果リスト〕

(査読有)

[1] SPring-8 publication ID = 21298

L. Do, H. Wang, C. Tinberg, E. Dowty, Y. Yoda, S. Cramer and S. Lippard: "Characterization of a Synthetic Peroxodiiron(III) Protein Model Complex by Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy" *Chemical Communications* **47** (2011) 10945-10947.

[2] SPring-8 publication ID = 22899

S. Kamali, H. Wang, D. Mitra, H. Ogata, W. Lubitz, B. C. Manor, T. B. Rauchfuss, D. Byrne, V. Bonnefoy, F. E. Jenney Jr., M. W. Adams, Y. Yoda, E. Alp, J. Zhao and S. P. Cramer: "Observation of the Fe-CN and Fe-CO Vibrations in the Active Site of [NiFe] Hydrogenase by Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy" *Angewandte Chemie International Edition* **52** (2013) 724-728.

[3] SPring-8 publication ID = 22946

S. J. George, B. M. Barney, D. Mitra, R. Y. Igarashi, Y. Guo, D. R. Dean, S. P. Cramer and L. C. Seefeldt: "EXAFS and NRVS Reveal a Conformational Distortion of the FeMo-cofactor in the MoFe Nitrogenase Propargyl Alcohol Complex" *Journal of Inorganic Biochemistry* **112** (2012) 85-92.

- [4] SPring-8 publication ID = 22900
Y. Guo, E. Brecht, K. Aznavour, J. Nix, Y. Xiao, H. Wang, S. George, R. Bau, S. Keable, J. Peters, M. W. Adams, F. E. Jenney Jr., W. Sturhahn, E. Alp, J. Zhao, Y. Yoda and S. P. Cramer: "Nuclear resonance vibrational spectroscopy (NRVS) of rubredoxin and MoFe protein crystals" *Hyperfine Interactions* (2012) 1-14.
- [5] SPring-8 publication ID = 23935
D. Mitra, S. J. George, Y. Guo, S. Kamali, S. Keable, J. W. Peters, V. Pelmeshnikov, D. A. Case and S. P. Cramer: "Characterization of [4Fe-4S] Cluster Dynamics and Structure in Nitrogenase Fe Protein at Three Oxidation Levels via Combined NRVS, EXAFS and DFT Analyses" *Journal of the American Chemical Society* **135** (2013) 2530–2543.
- [6] SPring-8 Publication ID = 23936
J. M. Kuchenreuther, Y. Guo, H. Wang, W. K. Myers, S. J. George, C. A. Boyke, Y. Yoda, E. Alp, J. Zhao, R. D. Britt, J. R. Swartz and S. P. Cramer: "Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy and Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy of ⁵⁷Fe-Enriched [FeFe] Hydrogenase Indicate Stepwise Assembly of the H-Cluster" *Biochemistry* **52** (2013) 818–826.

SPring-8 運転・利用状況

公益財団法人高輝度光科学研究センター
研究調整部

◎平成 25 年 9～11 月の運転・利用実績

SPring-8は9月24日から11月3日までセベラルバンチ運転で第5サイクルの運転を行い、11月5日から11月30日までセベラルバンチ運転で第6サイクルの運転を実施した。第5～6サイクルでは軌道変動によるアポート等による停止があったが、全体としては順調な運転であった。総放射光利用運転時間（ユーザータイム）内での故障等による停止時間（down time）は、第5サイクルは約0.3%、第6サイクルは約1.4%であった。

放射光利用実績（いずれも暫定値）については、実施された共同利用研究の実験数は、第5サイクルは合計332件、利用研究者は1,553名で、専用施設利用研究の実験数は合計213件、利用研究者は1,136名であった。第6サイクルは合計266件、利用研究者は1,185名で、専用施設利用研究の実験数は合計172件、利用研究者は855名であった。

1. 装置運転関係

(1) 運転期間

第5サイクル (9/24 (火) ～11/3 (日))

第6サイクル (11/5 (火) ～11/30 (土))

(2) 運転時間の内訳

第5サイクル

運転時間総計 約957時間

①装置の調整およびマシンスタディ等

約286時間

②放射光利用運転時間 約669時間

③故障等による down time 約2時間

総放射光利用運転時間(ユーザータイム=②+③)

に対する down time の割合 約0.3%

第6サイクル

運転時間総計 約601時間

①装置の調整およびマシンスタディ等

約97時間

②放射光利用運転時間 約496時間

③故障等による down time 約7時間

総放射光利用運転時間(ユーザータイム=②+③)

に対する down time の割合 約1.4%

(3) 運転スペック等

第5サイクル (セベラルバンチ運転)

- ・ 11 bunch train × 29
- ・ 1/14 filling + 12 bunches
- ・ 11/29 filling + 1 bunch
- ・ 203 bunches

第6サイクル (セベラルバンチ運転)

- ・ 11 bunch train × 29
- ・ 1/14 filling + 12 bunches
- ・ 203 bunches
- ・ 入射は電流値優先モード (2～3分毎 (マルチバンチ時) もしくは20～40秒毎 (セベラルバンチ時)) の Top-Up モードで実施。
- ・ 蓄積電流 8 GeV、～100 mA

(4) 主な down time の原因

- ・ 地震によるアポート
- ・ 軌道変動によるアポート

2. 利用関係

(1) 放射光利用実験期間

第5サイクル (10/3 (木) ～11/3 (日))

第6サイクル (11/6 (水) ～11/30 (土))

(2) ビームライン利用状況

稼働ビームライン

共用ビームライン	26本
専用ビームライン	19本
理研ビームライン	9本
加速器診断ビームライン	2本

第5サイクル (暫定値)

共同利用研究実験数	332 件
共同利用研究者数	1,553 名
専用施設利用研究実験数	213 件
専用施設利用研究者数	1,136 名

第6サイクル (暫定値)

共同利用研究実験数	266 件
共同利用研究者数	1,185 名
専用施設利用研究実験数	172 件
専用施設利用研究者数	855 名

◎平成 25 年 12 月の運転・利用実績

SPring-8 は 12 月 2 日から 12 月 21 日までセベラルバンチ運転で第 7 サイクルの運転を実施している。

第 7 サイクルの運転・利用実績については次号にて掲載する。

◎今後の予定

SPring-8 は 12 月 22 日から平成 26 年 3 月 31 日まで冬期点検調整期間とし、加速器やビームラインに係わる機器の改造・点検作業、電気・冷却設備等の機器の点検作業を実施する。

また、蓄積リング棟熱源機器の老朽化に伴い、電力需要の抑制や省エネルギー化を目的とし、熱源機器更新(機械・電気)設備工事を予定している。

論文発表の現状

公益財団法人高輝度光科学研究センター 利用業務部

年別査読有り論文発表登録数 (2013年12月31日現在)

*利用業務部が別刷りなどの資料を受け取り、Spring-8/SACLA を利用したという記述が確認できたもののみをカウント

Spring-8

Beamline Name		Public Use Since	~2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	Total	
Public Beamlines	BL01B1	XAFS	1997.10	113	21	32	39	35	54	57	57	73	54	43	578
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	50	11	14	10	10	10	10	19	11	13	15	173
	BL02B2	Powder Diffraction	1999.9	121	44	44	45	47	65	65	57	75	44	52	659
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	54	22	12	12	14	14	18	18	19	16	4	203
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999.9	29	19	12	20	40	17	25	28	22	27	20	259
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	40	9	10	17	15	7	7	11	20	17	11	164
	BL09XU	Nuclear Resonant Scattering	1997.10	37	7	8	11	12	11	9	7	13	9	8	132
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	87	20	29	20	33	32	24	33	29	22	13	342
	BL13XU	Surface and Interface Structure	2001.9	7	12	21	15	21	25	18	17	21	6	11	174
	BL14B2	Engineering Science Research II	2007.9						2	16	25	30	29	23	125
	BL19B2	Engineering Science Research I	2001.11	6	14	20	19	19	21	19	18	32	45	24	237
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999.9	50	25	13	16	15	22	12	12	23	21	12	221
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001.9	15	4	7	8	21	23	23	34	25	15	19	194
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998.4	75	31	39	20	42	24	20	20	24	19	22	336
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998.5	62	24	46	40	25	37	14	19	31	13	24	335
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999.9	12	7	8	8	15	15	14	9	13	8	13	122
	BL35XU	High Resolution Inelastic Scattering	2001.9	8	8	5	3	13	19	4	8	12	8	9	97
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	1	12	11	11	13	12	12	20	20	11	18	141
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	18	31	38	47	42	40	48	44	45	55	39	447
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	53	17	10	10	19	13	26	13	20	16	13	210
BL40B2	Structural Biology II	1999.9	73	40	37	32	44	22	26	39	38	34	50	435	
BL40XU	High Flux	2000.4	11	9	10	12	14	9	11	9	13	17	27	142	
BL41XU	Structural Biology I	1997.10	119	63	61	66	69	57	79	62	61	42	37	716	
BL43IR	Infrared Materials Science	2000.4	11	6	10	5	8	12	9	5	8	10	7	91	
BL46XU	Engineering Science Research III	2000.11	9	4	8	14	12	18	11	16	21	14	17	144	
BL47XU	HXPES・MCT	1997.10	43	17	26	25	27	20	26	23	24	14	32	277	
Public Use at Other Beamlines	BL11XU	Quantum Dynamics	1999.3	6	1	1	2	1	4					15	
	BL14B1	Materials Science	1998.4	18	2	3	3	7	3	3	2	2	1	44	
	BL15XU	WEBRAM	2002.9		6	4	8	7	7	2	1	1	1	37	
	BL17SU	RIKEN Coherent Soft X-ray Spectroscopy	2005.9					1	2	3	1	7	6	7	27
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002.9		1	3	1							5	
	BL22XU	Quantum Structural Science	2004.9			1	3		1					5	
	BL23SU	Actinide Science	1998.6	8	2	5	10	13	4	2	2			46	
	BL26B1	RIKEN Structural Genomics I	2009.4									3	5	2	10
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009.4								1		5	3	9
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002.9	1	2	1	4	2	4	1					15
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10									3	4	6	13
BL44B2	RIKEN Materials Science	1998.5	6	2	3									11	
BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	23	12	5	6	11	4	10	7	9	5	7	99	
Subtotal			1166	505	557	562	667	630	624	637	748	606	588	7290	

Beamline Name		Public Use Since	~2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	Total	
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterials	2009.11							1	4	8	18	31	
	BL07LSU	University-of-Tokyo Synchrotron Radiation Outstation	2009.11							1	5	6	9	21	
	BL08B2	Hyogo Prefecture BM	2005.9							1	1	3	2	7	
	BL11XU	Quantum Dynamics		13	7	10	7	13	8	7	8	6	8	9	96
	BL12B2	NSRRC BM	2001.9	20	20	24	15	8	8	7	9	4	8	3	126
	BL12XU	NSRRC ID	2003.2	1		5	6	6	8	5	15	9	14	5	74
	BL14B1	Materials Science		21	7	7	7	11	18	15	17	17	9	7	136
	BL15XU	WEBRAM	2001.4	31	5	3	13	14	15	29	35	48	39	45	277
	BL16B2	Sunbeam BM	1999.9	13	1	2	7	5	3	5	5	5	3	1	50
	BL16XU	Sunbeam ID	1999.9	4	4	5	6	4	2	5	5	2	2	2	41
	BL22XU	Quantum Structural Science			1	4	13	12	5	9	14	10	7	6	81
	BL23SU	Actinide Science		40	13	8	10	14	21	21	14	22	15	16	194
	BL24XU	Hyogo Prefecture ID	1998.10	71	11	9	7	12	7	8	5	6	7	7	150
	BL28XU	RISING	2012.4											2	2
	BL32B2	Pharmaceutical Industry (2002.9 - 2012.3)			6	3	2	4	6	1	2	3			27
	BL33LEP	Laser-Electron Photon	2000.10	14		2	2	2	3	5	8	1	1	3	41
	BL33XU	Toyota	2009.5									2	5	2	9
BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000.2	22	17	27	31	27	22	29	19	43	44	35	316	
Subtotal			250	92	109	126	132	126	146	159	188	179	172	1679	
RIKEN Beamlines	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		2	5	4	10	18	13	9	6	11	2	80	
	BL19LXU	SR Physics		10	11	6	11	12	5	10	3	3	8	3	82
	BL26B1	Structural Genomics I		2	18	35	24	20	23	14	12	5	7	5	165
	BL26B2	Structural Genomics II		1	5	5	7	6	19	6	16	17	18	8	108
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		46	13	17	9	20	14	9	11	5	15	11	170
	BL32XU	Targeted Proteins										1	8	5	14
	BL44B2	Materials Science		86	23	19	18	20	14	10	8	12	11	11	232
	BL45XU	Structural Biology I		76	20	19	16	14	15	9	6	5	4	2	186
Subtotal			221	92	106	89	102	108	71	65	54	82	47	1037	

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	~2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	Total
	BL3	XFEL	2012.3												9

Hardware / Software R & D	253	25	23	29	16	9	26	19	21	19	20	460
---------------------------	-----	----	----	----	----	---	----	----	----	----	----	-----

NET Sum Total	1619	600	684	668	789	757	763	773	852	732	670	8907
---------------	------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	------

NET Sum Total : 実際に登録されている件数 (本表に表示していない実験以外に関する文献を含む)
 複数ビームライン (BL) からの成果からなる論文はそれぞれのビームラインでカウントした。

このデータは論文発表等登録データベース (<http://user.spring8.or.jp/?p=748&lang=ja>) に 2013 年 12 月 31 日までに登録されたデータに基づいており、今後変更される可能性があります。

・本登録数は別刷等で SPring-8 または SACLA で行ったという記述が確認できたもののみとしています。

SPring-8 または SACLA での成果を論文等にする場合は必ずビームライン名および課題番号の記述を入れて下さい。

成果発表出版形式別登録数 (2013年12月31日現在)

*利用業務部が別刷りなどの資料を受け取り、Spring-8/SACLA を利用したという記述が確認できたもののみをカウント

Spring-8

Beamline Name		Public Use Since	Refereed papers	Proceedings	Other publications	Total	
Public Beamlines	BL01B1	XAFS	1997.10	578	53	73	704
	BL02B1	Single Crystal Structure Analysis	1997.10	173	15	26	214
	BL02B2	Powder Diffraction	1999. 9	659	37	68	764
	BL04B1	High Temperature and High Pressure Research	1997.10	203	8	38	249
	BL04B2	High Energy X-ray Diffraction	1999. 9	259	13	36	308
	BL08W	High Energy Inelastic Scattering	1997.10	164	10	33	207
	BL09XU	Nuclear Resonant Scattering	1997.10	132	14	26	172
	BL10XU	High Pressure Research	1997.10	342	21	53	416
	BL13XU	Surface and Interface Structure	2001. 9	174	12	30	216
	BL14B2	Engineering Science Research II	2007. 9	125	7	18	150
	BL19B2	Engineering Science Research I	2001.11	237	41	62	340
	BL20B2	Medical and Imaging I	1999. 9	221	63	68	352
	BL20XU	Medical and Imaging II	2001. 9	194	82	70	346
	BL25SU	Soft X-ray Spectroscopy of Solid	1998. 4	336	16	46	398
	BL27SU	Soft X-ray Photochemistry	1998. 5	334	18	27	379
	BL28B2	White Beam X-ray Diffraction	1999. 9	122	14	20	156
	BL35XU	High Resolution Inelastic Scattering	2001. 9	97	6	11	114
	BL37XU	Trace Element Analysis	2002.11	141	19	31	191
	BL38B1	Structural Biology III	2000.10	447	10	41	498
	BL39XU	Magnetic Materials	1997.10	210	14	63	287
	BL40B2	Structural Biology II	1999. 9	435	11	74	520
	BL40XU	High Flux	2000. 4	142	14	49	205
	BL41XU	Structural Biology I	1997.10	716	3	73	792
	BL43IR	Infrared Materials Science	2000. 4	91	12	38	141
BL46XU	Engineering Science Research III	2000.11	144	9	22	175	
BL47XU	HXPES・MCT	1997.10	277	92	100	469	
Public Use at Other Beamlines	BL11XU	Quantum Dynamics	1999. 3	15	2	3	20
	BL14B1	Materials Science	1998. 4	44	1	11	56
	BL15XU	WEBRAM	2002. 9	37	19	9	65
	BL17SU	RIKEN Coherent Soft X-ray Spectroscopy	2005. 9	27	1	24	52
	BL19LXU	RIKEN SR Physics	2002. 9	5		1	6
	BL22XU	Quantum Structural Science	2004. 9	5		1	6
	BL23SU	Actinide Science	1998. 6	46	6	18	70
	BL26B1	RIKEN Structural Genomics I	2009. 4	10		1	11
	BL26B2	RIKEN Structural Genomics II	2009. 4	9			9
	BL29XU	RIKEN Coherent X-ray Optics	2002. 9	15		1	16
	BL32XU	RIKEN Targeted Proteins	2010.10	13		2	15
	BL44B2	RIKEN Materials Science	1998. 5	11		3	14
	BL45XU	RIKEN Structural Biology I	1997.10	99	5	15	119
Subtotal			7289	648	1285	9222	

Beamline Name		Public Use Since	Refereed papers	Proceedings	Other publications	Total	
Contract Beamlines	BL03XU	Advanced Softmaterials	2009.11	31		1	32
	BL07LSU	University-of-Tokyo Synchrotron Radiation Outstation	2009.11	21			21
	BL08B2	Hyogo Prefecture BM	2005. 9	7			7
	BL11XU	Quantum Dynamics		96	6	8	110
	BL12B2	NSRRC BM	2001. 9	126	1	1	128
	BL12XU	NSRRC ID	2003. 2	74	6	3	83
	BL14B1	Materials Science		136	10	36	182
	BL15XU	WEBRAM	2001. 4	277	7	32	316
	BL16B2	Sunbeam BM	1999. 9	50	10	44	104
	BL16XU	Sunbeam ID	1999. 9	41	7	37	85
	BL22XU	Quantum Structural Science		81	2	21	104
	BL23SU	Actinide Science		194	41	80	315
	BL24XU	Hyogo Prefecture ID	1998.10	150	17	48	215
	BL28XU	RISING	2012. 4	2			2
	BL32B2	Pharmaceutical Industry (2002.9 - 2012. 3)		27		3	30
	BL33LEP	Laser-Electron Photon	2000.10	41	24	3	68
	BL33XU	Toyota	2009. 5	9	1	4	14
BL44XU	Macromolecular Assemblies	2000. 2	316		32	348	
Subtotal			1679	132	353	2164	
RIKEN Beamlines	BL17SU	Coherent Soft X-ray Spectroscopy		80	4	7	91
	BL19LXU	SR Physics		82	7	20	109
	BL26B1	Structural Genomics I		165	2	18	185
	BL26B2	Structural Genomics II		108	1	13	122
	BL29XU	Coherent X-ray Optics		170	14	30	214
	BL32XU	Targeted Proteins		14	1	1	16
	BL44B2	Materials Science		232	2	14	248
	BL45XU	Structural Biology I		186	5	38	229
Subtotal			1037	36	141	1214	

SACLA

Public Beamlines	Beamline Name		Public Use Since	Refereed papers	Proceedings	Other publications	Total
	BL3	XFEL	2012. 3	9		4	13
Hardware / Software R & D			460	470	425	1355	
NET Sum Total			8907	1135	1667	11709	

Refereed Papers : 査読有りの原著論文、査読有りのプロシーディングと博士論文
 Proceedings : 査読なしのプロシーディング
 Other publications : 発表形式が出版で、上記の二つに当てはまらないもの (総説、単行本、賞、その他として登録されたもの)
 NET Sum Total : 実際に登録されている件数 (本表に表示していない実験以外に関する文献を含む)
 複数ビームライン (BL) からの成果からなる論文等はそれぞれのビームラインでカウントした。

- ・本登録数は別刷等で SPring-8 または SACLA で行ったという記述が確認できたもののみとしています。
 SPring-8 または SACLA での成果を論文等にする場合は必ずビームライン名および課題番号の記述を入れて下さい。

最近 SPring-8 もしくは SACLA から発表された成果リスト

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用業務部

SPring-8 もしくは SACLA において実施された研究課題等の成果が公表された場合は JASRI の成果登録データベースに登録していただくことになっており、その内容は以下の URL (SPring-8 論文データベース検索ページ) で検索できます。

http://www.spring8.or.jp/ja/science/publication_database/

このデータベースに登録された原著論文の内、平成 25 年 10 月～12 月にその別刷もしくはコピー等を受理したもの（登録時期は問いません）を以下に紹介します。論文の情報（主著者、巻、発行年、ページ、タイトル）に加え、データベースの登録番号（研究成果番号）を掲載していますので、詳細は上記検索ページの検索結果画面でご覧いただくことができます。また実施された課題の情報（課題番号、ビームライン、実験責任者名）も掲載しています。課題番号は最初の 4 文字が「year」、次の 1 文字が「term」、後ろの 4 文字が「proposal no.」となっていますので、この情報から以下の URL で公表している、各課題の英文利用報告書 (SPring-8 User Experiment Report) を探してご覧いただくことができます。

http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/publications/user_exp_report/

今後も利用者情報には発行月の 2 ヶ月前の月末締めで、前号掲載分以降に登録された論文情報を掲載していく予定です。なお、データベースは毎日更新されていますので、最新情報は SPring-8 論文データベース検索ページでご確認ください。なお、実験責任者のかたには、成果が公表されましたら速やかに登録いただきますようお願いいたします。

SPring-8 研究成果登録データベースに 2013 年 10 月～12 月に登録された論文が掲載された主な雑誌と掲載論文数

掲載雑誌	登録論文数	掲載雑誌	登録論文数
Journal of Synchrotron Radiation	14	Journal of Electron Spectroscopy Related Phenomena	7
Acta Crystallographica Section D	12		
Acta Crystallographica Section F	11	Journal of Molecular Biology	7
The Journal of Biological Chemistry	9	Journal of the American Chemical Society	6
Journal of Physics: Conference Series	9	Journal of the Physical Society of Japan	6
Physical Review B	9	Physical Review Letters	6
Japanese Journal of Applied Physics	7	他全 141 誌、計 299 報	

課題の成果として登録された論文

Journal of Synchrotron Radiation

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25019	Hideshi Yokoyama	20 (2013) 933-937	2011A1893	BL26B1	横山 英志	Structural and Biochemical Analysis of a Thermostable Membrane-Bound Stomatin-Specific Protease
25042	Mitsuhiro Hirai	20 (2013) 869-874	2012B1095	BL40B2	平井 光博	Structure of Liposome Encapsulating Proteins Characterized by X-ray Scattering and Shell-Modeling
			2012A1077	BL40B2	平井 光博	
			2011A1929	BL40B2	平井 光博	
			2009B1730	BL40B2	平井 光博	
25069	Kazuya Hasegawa	20 (2013) 910-913	2009B2111	BL41XU	清水 伸隆	SPring-8 BL41XU, a High-Flux Macromolecular Crystallography Beamline
			2010B2025	BL41XU	清水 伸隆	
			2011A2004	BL41XU	長谷川 和也	
			2011B2106	BL41XU	長谷川 和也	
			2012A1832	BL41XU	長谷川 和也	
			2012B1984	BL41XU	奥村 英夫	
			2013A1900	BL41XU	長谷川 和也	
			2011B1005	BL41XU	山本 雅貴	
25070	Nobuhiro Mizuno	20 (2013) 999-1002	2012A1834	BL38B1	馬場 清喜	A Convenient Tool for Gas Derivatization Using Fine-Needle Capillary Mounting for Protein Crystals
			2012B1910	BL38B1	馬場 清喜	
			2012B1984	BL41XU	奥村 英夫	
25071	Nobutaka Shimizu	20 (2013) 948-952	2006B1392	BL38B1	清水 伸隆	Development of an Online UV-Visible Microspectrophotometer for a Macromolecular Crystallography Beamline
			2007A1058	BL38B1	清水 伸隆	
			2007B1511	BL38B1	清水 伸隆	
			2008A1232	BL38B1	清水 伸隆	
			2008B1325	BL38B1	清水 伸隆	
			2009A1430	BL38B1	清水 伸隆	
			2009B1580	BL38B1	清水 伸隆	
			2010A1269	BL38B1	清水 伸隆	
			2010B2027	BL38B1	清水 伸隆	
			2005B0463	BL38B1	清水 伸隆	
25123	Mika Hirose	20 (2013) 923-928	2012B1295	BL38B1	杉山 成	Structure of the Human-Heart Fatty-Acid-Binding Protein 3 in Complex with the Fluorescent Probe 1-anilinonaphtalene-8-sulphonic Acid
			2012B6724	BL44XU	杉山 成	
			2012A1370	BL38B1	杉山 成	
			2012A6724	BL44XU	杉山 成	
25143	Takeshi Hiromoto	20 (2013) 894-898	2009A1557	BL38B1	玉田 太郎	Crystal Structure of UDP-glucose:anthocyanidin 3-O-glucosyltransferase from <i>Crotalaria tematea</i>
25220	Hiroshi Fukui	20 (2013) 591-595	2010A1982	BL35XU	石川 大介	Large-Aperture Refractive Lenses for Momentum-Resolved Spectroscopy with Hard X-rays
25263	Emily A. Gray	20 (2013) 756-764	2010A1528	BL28B2	Schwenke Daryl	Assessment of the Serotonin Pathway as a Therapeutic Target for Pulmonary Hypertension
			2010B1200	BL28B2	Schwenke Daryl	
25600	Masaki Oura	21 (2014) 183-192	2013A8050	BL3	大浦 正樹	Development of a Single-Shot CCD-based Data Acquisition System for Time-Resolved X-ray Photoelectron Spectroscopy at an X-ray Free-Electron Laser Facility
			理研	BL17SU		
			理研	BL19LXU		
25601	Takayoshi Yamamoto	21 (2014) 161-164	2011A7297	BL03XU	奥田 浩司	Grazing-Incidence Small-Angle X-ray Scattering from Ge Nanodots Self-Organized on Si(001) Examined with Soft X-rays
			2012B1950	BL03XU	小川 紘樹	
25604	Masahiro Yoshida	21 (2014) 131-135	2010A3502	BL11XU	石井 賢司	Momentum-Resolved Resonant Inelastic X-ray Scattering on a Single Crystal under High Pressure
			2010B3502	BL11XU	石井 賢司	
			2011A3502	BL11XU	石井 賢司	
			2011A4261	BL12XU	石井 賢司	
25615	Andrzej Andrejczuk	21 (2014) 57-60	2006B0097	BL08W	桜井 浩	A Planar Parabolic Refractive Nickel Lens for High-Energy X-rays
			2007B0097	BL08W	桜井 浩	
25617	Hiroyuki Kishimoto	21 (2014) 1-4	2011B1244	BL20XU	岸本 浩通	Pinhole-Type Two-Dimensional Ultra-Small-Angle X-ray Scattering on the Micrometer Scale
			2012A1686	BL20XU	岸本 浩通	
			2012B1809	BL20XU	岸本 浩通	
			2012B7260	BL03XU	岸本 浩通	
			2013A1416	BL20XU	岸本 浩通	

Journal of Physics: Conference Series

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
24988	Kuniyuki Ichii	417 (2013) 012049	2011A1718	BL14B2	西本 哲朗	Correlation between Local Atomic Structure and Ultraviolet Luminescence of AlGdN Thin Films
25117	Akihisa Takeuchi	463 (2013) 012034	2010B1097	BL20XU	竹内 晃久	Development of Scanning Imaging X-Ray Microscopy for Quantitative Three-Dimensional Phase Contrast Microimaging
			2011A1449	BL20XU	竹内 晃久	
			2011A1453	BL47XU	竹内 晃久	
			2012A1239	BL47XU	竹内 晃久	
25178	Toshiya Inami	425 (2013) 132011	2010A3711	BL22XU	稲見 俊哉	Double Phase-Plate Setup for Chromatic Aberration Compensation for Resonant X-ray Diffraction Experiments
25254	Hidekazu Takano	463 (2013) 012025	2011B3203	BL24XU	高野 秀和	Development of Real-Time X-ray Microtomography System
			2011B3247	BL24XU	中野 真也	
			2012A3203	BL24XU	高野 秀和	
			2012A3247	BL24XU	中野 真也	
25346	Yoshito Nishitani	391 (2012) 012115	2010A1244	BL25SU	山崎 篤志	Bulk-Sensitive Photoemission Spectroscopy of TlFe ₂ Se ₂
25347	Atsushi Yamasaki	391 (2012) 012141	2009A1122	BL25SU	山崎 篤志	Electronic Structures of the FeSe Superconductor Studied by High-Energy Photoelectron Spectroscopy
			2008B1149	BL27SU	山崎 篤志	
25383	Yoshio Suzuki	463 (2013) 012019	2011B1190	BL20XU	鈴木 芳生	Hard X-ray Nanoprobe with Spherical-Aberration-Corrected Quad-Spherical-Mirror Optics
			2010B1136	BL20XU	鈴木 芳生	
25384	Yoshio Suzuki	463 (2013) 012028	2011A1322	BL47XU	鈴木 芳生	Hard X-ray Imaging Microscopy Using X-ray Guide Tube as Beam Condenser for Field Illumination

Physical Review B

24821	Yukiharu Takeda	88 (2013) 075108	2009B3825	BL23SU	竹田 幸治	Separation of Magnetic Properties at Uranium and Cobalt Sites in UCoAl Using Soft X-ray Magnetic Circular Dichroism
			2010A3825	BL23SU	竹田 幸治	
			2011B3825	BL23SU	竹田 幸治	
25048	Kazuhiro Matsuda	88 (2013) 115125	2006B1155	BL08W	乾 雅祝	Electron Momentum Density in Liquid Silicon
			2007A1170	BL08W	乾 雅祝	
			2008B1106	BL08W	乾 雅祝	
			2009A1252	BL08W	松田 和博	
			2010B1170	BL08W	乾 雅祝	
25063	Manami Ogawa	88 (2013) 165313	2009B7401	BL07LSU	松田 巖	Relaxations of the Surface Photovoltage Effect on the Atomically Controlled Semiconductor Surfaces Studied by Time-Resolved Photoemission Spectroscopy
			2010A7401	BL07LSU	松田 巖	
			2010B7401	BL07LSU	松田 巖	
			2011A7401	BL07LSU	松田 巖	
			2012A7401	BL07LSU	山本 達	
2012B7401	BL07LSU	山本 達				
25181	Ignace Jarrige	86 (2012) 115104	2010A4256	BL12XU	Jarrige Ignace	Resonant Inelastic X-ray Scattering Study of Charge Excitations in Superconducting and Non-superconducting PrFeAsO _{1-y}
25288	Kohei Yoshimatsu	88 (2013) 174423	2011A1624	BL47XU	和達 大樹	Spectroscopic Studies on the Electronic and Magnetic States of Co-doped Perovskite Manganite Pr _{0.8} Ca _{0.2} Mn _{1-y} Co _y O ₃ Thin Films
25317	Zheng Lu	88 (2013) 094521	2011A1938	BL02B2	久保園 芳博	Superconductivity in (NH ₃) ₉ Cs _{0.4} FeSe
			2011B1496	BL02B2	久保園 芳博	
25350	Carlos E. Viol Barbosa	88 (2013) 195128	2012A0043	BL47XU	Felser Claudia	Direct Observation of Band Bending in the Topological Insulator Bi ₂ Se ₃
25426	Akira Yasui	87 (2013) 075131	2011B3831	BL23SU	保井 晃	Observation of Bulk Band Dispersions of YbRh ₂ Si ₂ using Soft X-ray Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy
			2010B3831	BL23SU	保井 晃	

Japanese Journal of Applied Physics-1

24960	Yoshiyuki Yamashita	52 (2013) 108005	2010A4800	BL15XU	小林 啓介	New Direct Spectroscopic Method for Determination of Bias-Dependent Electronic States: Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy Under Device Operation
			2011A4604	BL15XU	山下 良之	
24991	Tatsumi Hioki	52 (2013) 107301	2008A5071	BL16XU	野崎 洋	Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry Study on the Increase in the Amount of Pr Atoms for Cs-Ion-Implanted Pd/CaO Multilayer Complex with Deuterium Permeation
			2009B5072	BL16XU	野崎 洋	
			2010B5070	BL16XU	野崎 洋	
			2011A5071	BL16XU	野崎 洋	
			2011B5070	BL16XU	野崎 洋	
2012A5070	BL16XU	野崎 洋				

Japanese Journal of Applied Physics-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25062	Shuichi Ogawa	52 (2013) 110128	2006B1628	BL23SU	高桑 雄二	Relation between Oxidation Rate and Oxidation-Induced Strain at SiO ₂ /Si(001) Interfaces during Thermal Oxidation Processes
			2012A3808	BL23SU	小川 修一	
			2006A1744	BL23SU	高桑 雄二	
25073	Masamitsu Takachi	52 (2013) 090202	2013A1649	BL02B2	守友 浩	Redox Reaction in Prussian Blue Analogue Films with Fast Na ⁺ Interaction
			2012A1094	BL02B2	守友 浩	
25098	Shuichi Ogawa	52 (2013) 110122	2010B3879	BL23SU	高桑 雄二	Graphene Growth and Carbon Diffusion Process during Vacuum Heating on Cu(111)/Al ₂ O ₃ Substrates
			2012B3808	BL23SU	小川 修一	
25494	Fumihiko Matui	52 (2013) 110110	2011B7421	BL07LSU	大門 寛	Characterizing Edge and Stacking Structures of Exfoliated Graphene by Photoelectron Diffraction
			2012A7431	BL07LSU	大門 寛	
			2012B7434	BL07LSU	大門 寛	
25618	Takashi Kunimoto	52 (2013) 042402	2004B0111	BL01B1	國本 崇	Detailed Impurity Phase Investigation by X-ray Absorption Fine Structure and Electron Spin Resonance Analysis of CaMgSi ₂ O ₆ :Eu Phosphor

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena

25119	Carlos Viol Barbosa	189 (2013) 146-151	2012A0043	BL47XU	Felser Claudia	Magnetic Dichroism in Angular Resolved Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy from Buried Magnetic Layers
25351	Siham Ouardi	190 (2013) 249-267	2007A4903	BL15XU	Fecher Gerhard	Bulk Electronic Structure Studied by Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy of the Valence Band: The Case of Intermetallic Compounds
			2007B4904	BL15XU	Felser Claudia	
			2008A4905	BL15XU	Felser Claudia	
			2008B4903	BL15XU	Felser Claudia	
			2009A4905	BL15XU	Felser Claudia	
			2010A4903	BL15XU	Fecher Gerhard	
			2010B4903	BL15XU	Fecher Gerhard	
			2011A4901	BL15XU	Fecher Gerhard	
			2011A1464	BL47XU	Fecher Gerhard	
			2012A0043	BL47XU	Felser Claudia	
			2008A0017	BL47XU	Felser Claudia	
			2008B0017	BL47XU	Felser Claudia	
			25477	Eiji Ikenaga	190 (2013) 180-187	
2011B1537	BL47XU	池永 英司				
2011A1420	BL47XU	池永 英司				
2010B1425	BL47XU	池永 英司				
2009B1933	BL47XU	池永 英司				
2009A1889	BL47XU	池永 英司				
25510	Shigenori Ueda	190 (2013) 235-241	2006B1604	BL47XU	木村 昭夫	Application of Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy to Electronic Structure Measurements for Various Functional Phenomena
			2007A4903	BL15XU	Fecher Gerhard	
			2007A4608	BL15XU	長田 実	
			2008A4802	BL15XU	島田 賢也	
			2007B4605	BL15XU	長田 実	
			2008A4602	BL15XU	長田 実	
			2008A4800	BL15XU	小林 啓介	
			2009A4600	BL15XU	南風盛 将光	
			2007A4609	BL15XU	大橋 直樹	
			2007B4607	BL15XU	大橋 直樹	
25605	J. Minar	190 (2013) 159-164	2008A4906	BL15XU	Fadley Charles	Recent Developments in the Theory of HARPES
			2008B4800	BL15XU	小林 啓介	
			2009A4906	BL15XU	Fadley Charles	
25606	Charles Fadley	190 (2013) 165-179	2008A4906	BL15XU	Fadley Charles	Hard X-ray Photoemission with Angular Resolution and Standing-Wave Excitation
			2009A4906	BL15XU	Fadley Charles	
			2009B4804	BL15XU	小林 啓介	
			2010A4902	BL15XU	Fadley Charles	

Journal of the Physical Society of Japan-1

25074	Takahiro Shimono	82 (2013) 083601	2013A1649	BL02B2	守友 浩	Structural Response of P2-Type Na _x MnO ₂ against Na ⁺ Interaction
			2012B1753	BL02B2	小林 航	

Journal of the Physical Society of Japan-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25121	Tomohiro Matsushita	82 (2013) 114005	2006B1019	BL25SU	松下 智裕	Element Assignment for Three-Dimensional Atomic Imaging by Photoelectron Holography
			2007A1278	BL25SU	松下 智裕	
25179	Hirohito Nakai	82 (2013) 124712	2011B3711	BL22XU	稲見 俊哉	Temperature and Magnetic Field Dependent Yb Valence in YbRh ₂ Si ₂ Observed by X-ray Absorption Spectroscopy
			2012B0046	BL39XU	渡辺 真仁	
			2010B1349	BL39XU	松田 康弘	
25322	Naoyuki Katayama	82 (2013) 123702	2012A0083	BL02B1	澤 博	Superconductivity in Ca _{1-x} La _x FeAs ₂ : A Novel 112-Type Iron Pnictide with Arsenic Zigzag Bonds
			2012B0083	BL02B1	澤 博	
			2013A0083	BL02B1	澤 博	
25461	Takahiro Onimaru	83 (2014) 013701	2009B1959	BL39XU	河村 直己	Simultaneous Pressure-Induced Magnetic and Valence Transitions in Type-I Clathrate Eu ₅ Ga ₁₆ Ge ₃₀
			2010A1477	BL39XU	鬼丸 孝博	
			2010B1564	BL39XU	鬼丸 孝博	
25610	Hideaki Sakai	83 (2014) 014709	2013A1902	BL01B1	宇留賀 朋哉	Insulator-to-Superconductor Transition upon Electron Doping in a BiS ₂ -Based Superconductor Sr _{1-x} La _x BiS ₂

Acta Crystallographica Section D

25068	Seiki Baba	69 (2013) 1839-1849	2009B2091	BL38B1	馬場 清喜	Humidity Control and Hydrophilic Glue Coating Applied to Mounted Protein Crystals Improves X-ray Diffraction Experiments
			2010A1974	BL38B1	馬場 清喜	
			2010B2012	BL38B1	馬場 清喜	
			2011A2043	BL38B1	馬場 清喜	
			2011A2054	BL38B1	馬場 清喜	
			2011B2104	BL38B1	馬場 清喜	
			2012A1834	BL38B1	馬場 清喜	
			2012B1910	BL38B1	馬場 清喜	
25162	Mutsuko Kukimoto	67 (2011) 763-773	2010B5930	BL32B2	川本 雅毅	Inhibitor-Bound Structures of Human Pyruvate Dehydrogenase Kinase 4
25280	Yasushi Hikida	66 (2010) 1301-1307	2006B1766	BL41XU	関根 俊一	Structure of an Archaeal Homologue of the Bacterial Fmu/RsmB/RrmB rRNA Cytosine 5-methyltransferase
25463	Naoki Horikoshi	69 (2013) 2431-2439	2010A1206	BL41XU	胡桃坂 仁志	Structural Polymorphism in the L1 Loop Regions of Human H2A.Z.1 and H2A.Z.2
			2011A1528	BL41XU	胡桃坂 仁志	
25566	Bunzo Mikami	68 (2012) 1207-1216	2005B0275	BL38B1	三上 文三	Induced-Fit Motion of a Lid Loop Involved in Catalysis in Alginate Lyase A1-II

Applied Physics Letters

24984	S. Chakraverty	103 (2013) 142416	2012A1624	BL47XU	和達 大樹	BaFeO ₃ Cubic Single Crystalline Thin Films: A Ferromagnetic Insulator
			2012B1757	BL47XU	和達 大樹	
25050	Chiradeep Gupta	103 (2013) 171902	2011A1498	BL20XU	小林 正和	Micro-Pore Development Phenomenon in Hydrogen Pre-Charged Aluminum Alloy Studied using Synchrotron X-ray Micro-Tomography
25156	Koji Horiba	103 (2013) 193114	2011B7419	BL07LSU	藤原 宏平	Observation of Rebirth of Metallic Paths during Resistance Switching of Metal Nanowire
			2012A7424	BL07LSU	神吉 輝夫	
			2013A7446	BL07LSU	神吉 輝夫	
			2012A7402	BL07LSU	堀場 弘司	
			2012B7402	BL07LSU	堀場 弘司	
25291	Anh Nguyen	103 (2013) 223105	2012B4910	BL15XU	服部 梓	Colossal Magnetoresistive (La,Pr,Ca)MnO ₃ Nanobox Array Structures Constructed by the Three-Dimensional Nanotemplate Pulsed Laser Deposition Technique
25509	Keita Ito	103 (2013) 232403	2012A4806	BL15XU	木村 昭夫	Electronic Structures and Magnetic Moments of Co ₃ FeN Thin Films Grown by Molecular Beam Epitaxy
			2013A3880	BL23SU	木村 昭夫	
			2012B3840	BL23SU	木村 昭夫	

Inorganic Chemistry-1

25041	Yasuhide Akizuki	52 (2013) 11538-11543	2011A1641	BL02B2	藤田 晃司	A-Site-Ordered Perovskite MnCu ₃ V ₄ O ₁₂ with a 12-Coordinated Manganese(II)
			2012A1677	BL02B2	藤田 晃司	
			2012A1554	BL02B2	秋月 康秀	
25049	Atsunobu Masuno	52 (2013) 11889-11894	2008B1040	BL02B2	増野 敦信	Weak Ferromagnetic Transition with a Dielectric Anomaly in Hexagonal Lu _{0.5} Sc _{0.5} FeO ₃
			2010A1220	BL02B2	増野 敦信	
25267	Naoaki Yabuuchi	52 (2013) 9131-9142	2011B1729	BL02B2	駒場 慎一	A Comparative Study of LiCoO ₂ Polymorphs: Structural and Electrochemical Characterization of O2-, O3-, and O4-type Phases
			2012A1672	BL02B2	駒場 慎一	

Inorganic Chemistry-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25319	Ikuya Yamada	52 (2013) 13751-13761	2010B1707	BL02B2	山田 幾也	Control of Bond-Strain-Induced Electronic Phase Transition in Iron Perovskites
			2011A1047	BL02B2	山田 幾也	
			2012A1002	BL25SU	山田 幾也	
			2012A1619	BL02B2	山田 幾也	
			2013A1042	BL27SU	山田 幾也	
			2013A1043	BL02B2	山田 幾也	
25521	Alexei Belik	52 (2013) 12005-12011	2011B4512	BL15XU	Belik Alexei	High-Pressure Synthesis, Crystal Structures, and Properties of ScRhO ₃ and InRhO ₃ Perovskites
			2012A4507	BL15XU	Belik Alexei	

The Journal of Biological Chemistry

24469	Takao Arimori	288 (2013) 18696-18706	2009B1314	BL38B1	玉田 太郎	Crystal Structures of the Catalytic Domain of a Novel Glycohydrolase Family 23 Chitinase from <i>Ralstonia</i> sp. A-471 Reveals a Unique Arrangement of the Catalytic Residues for Inverting Chitin Hydrolysis
25349	Masaki Unno	288 (2013) 34443-34458	2005A0051	BL38B1	海野 昌喜	Structures of the Substrate-Free and Product-Bound Forms of HmuO, a Heme Oxygenase from <i>Corynebacterium diphtheriae</i> : X-ray Crystallography and Molecular Dynamics Investigation
			理研	BL44B2		
25578	Kwang Hoon Sung	288 (2013) 23234-23243	2011A6686	BL44XU	Song Hyun Kyu	Structural and Biochemical Analyses of the Eukaryotic Heat Shock Locus V (HslV) from <i>Trypanosoma brucei</i>
25597	Sho Amatsu	288 (2013) 35617-35625	2010A6515	BL44XU	北所 健悟	Crystal Structure of <i>Clostridium botulinum</i> Whole Hemagglutinin Reveals a Huge Triskelion-shaped Molecular Complex
			2010B6515	BL44XU	北所 健悟	
			2011A6615	BL44XU	北所 健悟	
			2011B6615	BL44XU	北所 健悟	
			2012A6715	BL44XU	北所 健悟	
			2012B6715	BL44XU	北所 健悟	
25603	Aya Kitamura	287 (2012) 43950-43960	2005A0760	BL41XU	別所 義隆	Characterization and Structure of the <i>Aquifex aeolicus</i> Protein DUF752: A Bacterial tRNA-methyltransferase (<i>MnmC2</i>) Functioning without the Usually Fused Oxidase Domain (<i>MnmC1</i>)

Physical Review Letters

24998	Jun Fujii	111 (2013) 097201	2011A1464	BL47XU	Fecher Gerhard	Identifying the Electronic Character and Role of the Mn States in the Valence Band of (Ga,Mn)As
			2010B4900	BL15XU	Panaccione Giancarlo	
25105	Sang Hoon Hwang	108 (2012) 092001	2007A6001	BL33LEP	堀田 智明	Spin-Density Matrix Elements for $\gamma p \rightarrow K^0 \Sigma^+$ at $E_\gamma = 1.85$ -3.0 GeV with Evidence for the $\kappa(800)$ Meson Exchange
25216	Ryuji Okazaki	111 (2013) 217801	2011B1221	BL43IR	寺崎 一郎	Optical Conductivity Measurement of a Dimer Mott-Insulator to Charge-Order Phase Transition in a Two-Dimensional Quarter-Filled Organic Salt Compound
			2011B1232	BL43IR	岡崎 竜二	
			2012A1082	BL43IR	寺崎 一郎	
			2012A1141	BL43IR	岡崎 竜二	
			2012B1352	BL43IR	寺崎 一郎	
			2012B1223	BL43IR	岡崎 竜二	
25590	Goetz Berner	110 (2013) 247601	2011B3820	BL23SU	菅 滋正	Direct <i>k</i> -Space Mapping of the Electronic Structure in an Oxide-Oxide Interface
25602	Yoshihisa Harada	111 (2013) 193001	2011B7403	BL07LSU	原田 慈久	Selective Probing of the OH or OD Stretch Vibration in Liquid Water Using Resonant Inelastic Soft-X-Ray Scattering
			2012A7403	BL07LSU	原田 慈久	
			2012B7403	BL07LSU	原田 慈久	
			理研	BL17SU		

Acta Crystallographica Section F-1

25429	Minghao Chen	69 (2013) 834-838	2011B1227	BL41XU	姚 閔	Structure of Dihydrouridine Synthase C (DusC) from <i>Escherichia coli</i>
			2011A1062	BL41XU	姚 閔	
25430	Takaki Sugawara	69 (2013) 868-870	2012A1179	BL41XU	田中 良和	Preliminary X-ray Crystallographic Study of Ataphylococcal α -haemolysin Monomer
			2011B1462	BL41XU	田中 良和	
			2012A1199	BL40B2	郷田 秀一郎	
25563	Krisna Prak	69 (2013) 937-941	2007A1439	BL38B1	三上文三	Purification, Crystallization and Preliminary Crystallographic Analysis of Soybean Mature Glycinin A1bB2
			2007B1490	BL38B1	三上文三	
			2008A1263	BL38B1	三上文三	
			2008B1574	BL38B1	三上文三	

Acta Crystallographica Section F-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25565	Kimihiko Mizutani	68 (2012) 1164-1168	2010B1181	BL26B1	三上 文三	Structure of β -1,4-mannanase from the Common Sea Hare <i>Aplisia kurodai</i> at 1.05 Å Resolution
			2010A1489	BL26B1	三上 文三	

Chemistry - A European Journal

25020	Tetsuo Okujima	19 (2013) 13970-13978	2012B1324	BL38B1	久木 一朗	Acenaphthylene-Fused Cyclo[8]pyrroles with Intense Near-IR-Region Absorption Bands
25227	Takahiro Iwamoto	19 (2013) 14061-14068	2013A1661	BL02B1	山子 茂	Size- and Orientation-Selective Encapsulation of C ₇₀ by Cycloparaphenylenes
			2012B1790	BL02B1	山子 茂	
			2013A1705	BL40XU	高谷 光	
			2012B1815	BL40XU	高谷 光	
			2012A1625	BL40XU	高谷 光	
25258	Kazuki Ogata	19 (2013) 12356-12375	2011B1545	BL40XU	高谷 光	Synthesis and Self-Assembly of NCN-Pincer Pd-Complex-Bound Norvalines
			2010B1488	BL38B1	高谷 光	
			2010A1455	BL38B1	高谷 光	
			2011A1614	BL40B2	尾形 和樹	
			2009B1463	BL40B2	高谷 光	
			2009A1577	BL40B2	高谷 光	
			2008A1034	BL40B2	高谷 光	
			2012B1815	BL40XU	高谷 光	
25473	Hiromitsu Maeda	19 (2013) 11676-11685	2012A1625	BL40XU	高谷 光	Formation and Geometrical Control of Polygon-Like Metal-Coordination Assemblies
			2011B1545	BL40XU	高谷 光	
			2010B1489	BL40XU	安田 伸広	
			2011B1535	BL40B2	前田 大光	

Nuclear Physics A

25107	Masayuki Niiyama	914 (2013) 543-552	2006A6001	BL33LEP	堀田 智明	Recent Results from LEPS and Prospects of LEPS II at SPring-8
			2006B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2008A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2008B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2009A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2009B6001	BL33LEP	堀田 智明	
25110	Wen Chen Chang	835 (2010) 239-245	2006A6001	BL33LEP	堀田 智明	Photoproduction of Hyperons at SPring-8/LEPS
			2006B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2008A6001	BL33LEP	堀田 智明	
25111	Takashi Nakano	835 (2010) 254-260	2008B6001	BL33LEP	堀田 智明	Status of the Θ^+ Analysis at LEPS
			2006A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2006B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007A6001	BL33LEP	堀田 智明	
25112	Jung Keun Ahn	835 (2010) 329-332	2007B6001	BL33LEP	堀田 智明	The Nature of the $\Lambda(1405)$ from Photoproduction at SPring-8/LEPS
			2006A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2006B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2008A6001	BL33LEP	堀田 智明	
2008B6001	BL33LEP	堀田 智明				

Journal of Molecular Biology

23923	Hisashi Yoshida	423 (2012) 351-364	2011B6635	BL44XU	朴 三用	Crystal Structures of Penicillin-Binding Protein 3 (PBP3) from Methicillin-Resistant <i>Staphylococcus aureus</i> in the Apo and Cefotaxime-Bound Forms
25142	Mitsugu Yamada	425 (2013) 4295-4306	2012A1412	BL38B1	玉田 太郎	Elucidations of the Catalytic Cycle of NADH-Cytochrome b ₅ Reductase by X-ray Crystallography: New Insights into Regulation of Efficient Electron Transfer
25431	Takeshi Hayashi	425 (2013) 3289-3300	2005B0417	BL38B1	田中 勲	SCO4008, a Putative TetR Transcriptional Repressor from <i>Streptomyces coelicolor</i> A3(2), Regulates Transcription of <i>sco4007</i> by Multidrug Recognition

Dalton Transactions

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25031	A. Gallo	42 (2013) 12714-12724	2003A0386	BL10XU	泉 康雄	Cluster-Derived Ir-Sn/SiO ₂ Catalysts for the Catalytic Dehydrogenation of Propane: a Spectroscopic Study
			2004A0122	BL37XU	泉 康雄	
25200	Norimitsu Tohnai	42 (2013) 15922-15926	2010B1861	BL19B2	藤内 謙光	A Facile and Versatile Approach to Efficient Enhancement of Solid-State Luminescence by Organic-Inorganic Hybrid Salts
			2010B1929	BL19B2	藤内 謙光	
			2012A1592	BL38B1	杉野 光彩	
25257	Katsuhiko Isozaki	42 (2013) 15953-15966	2013A1661	BL02B1	山子 茂	Metal Array Fabrication Based on Ultrasound-Induced Self-Assembly of Metalated Dipeptides
			2009A1805	BL19B2	高谷 光	
			2010A1721	BL19B2	畠山 琢次	
			2009A1577	BL40B2	高谷 光	
			2011A1614	BL40B2	尾形 和樹	
			2009B1463	BL40B2	大谷 福寿	
			2013A1705	BL40XU	高谷 光	
2012B1815	BL40XU	高谷 光				

ECS Transactions

24690	Masashi Matsumoto	50 (2013) 1759-1767	2012A1011	BL46XU	宮崎 孝	Surface Reaction Analysis of Tantalum-Oxide Oxygen-Reduction Catalysts by Using X-ray Photoelectron Spectroscopy
			2011A1691	BL46XU	今井 英人	
			2010B1890	BL46XU	太田 健一郎	
			2010B1011	BL46XU	石原 顕光	
			2010A1738	BL46XU	今井 英人	
25414	Kazushi Miki	50 (2013) 205-213	2009B2066	BL46XU	石原 顕光	Gold Nanoparticle 2D-Arrays Chemically Immobilized as Large-Area Near-Field Light Source
			2009B1471	BL40B2	磯崎 勝弘	
			2010B1744	BL40B2	磯崎 勝弘	
25454	Naoto Kitamura	58 (2013) 167-172	2012A1575	BL40B2	田口 知弥	Crystal and Electronic Structures of LaP ₃ O ₉ -Based Protonic Conductors Synthesized by Liquid-Phase Method
			2012B1350	BL02B2	井手本 康	

Electrochemistry

25147	Okie Sekizawa	79 (2011) 80-85	2009B1807	BL19B2	伊藤 孝憲	Effect of Excess Li and Cation Mixing on Electronic Structure of LiNi _{0.5} Mn _{0.5} O ₂ Cathode Active Material of Lithium-Ion Battery Investigated by First-Principle Calculation
25153	Yasushi Idemoto	80 (2012) 791-799	2011A1853	BL19B2	井手本 康	Investigation on Crystal and Electronic Structures of 0.5Li ₂ MnO ₃ -0.5LiMn _x Ni _x Co _(1-2x) O ₂ (x = 1/3, 5/12) Samples Heat-Treated under Vacuum Reducing Conditions
			2011A1974	BL14B2	井手本 康	
25456	Yasushi Idemoto	81 (2013) 971-976	2011A1853	BL19B2	井手本 康	Substitution Effect on Cathode Property, Crystal and Electronic Structures of LiMn _{0.5} Ni _{0.5} O ₂ as Cathode Active Material for Li-Ion Battery

Journal of Applied Physics

25003	Takumi Ohtsuki	114 (2013) 143905	2012A1645	BL17SU	堀田 善治	Nanoscale Characterization of FeNi Alloys Processed by High-Pressure Torsion Using Photoelectron Emission Microscope
			2012B1748	BL17SU	堀田 善治	
25124	Yoshihiro Ueoka	114 (2013) 163713	2012A1552	BL25SU	上岡 義弘	Analysis of Electronics Structure of Amorphous InGaZnO/SiO ₂ Interface by Angle-Resolved X-ray Photoelectron Spectroscopy
			2012B1663	BL25SU	上岡 義弘	
25177	Akane Agui	114 (2013) 183904	2007A1360	BL08W	安居院 あかね	Microscopic Magnetic Properties of an Oxygen-Doped Tb-Fe Thin Film by Magnetic Compton Scattering
			2008B1643	BL08W	安居院 あかね	
			2010B1152	BL08W	安居院 あかね	

The Journal of Physical Chemistry C-1

25024	Akimitsu Ishihara	117 (2013) 18837-18844	2008B1850	BL14B2	石原 顕光	Emergence of Oxygen Reduction Activity in Partially Oxidized Tantalum Carbonitrides: Roles of Deposited Carbon for Oxygen-Reduction-Reaction-Site Creation and Surface Electron Conduction
			2008B5392	BL16B2	今井 英人	
			2009A5391	BL16B2	今井 英人	
			2009B5390	BL16B2	今井 英人	
			2008A1892	BL14B2	石原 顕光	
			2009A1803	BL14B2	石原 顕光	
			2009B1821	BL14B2	石原 顕光	

The Journal of Physical Chemistry C-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	チームライン	実験責任者	タイトル
25334	Yasushi Amada	116 (2012) 23503-23514	2012A1089	BL01B1	奥村 和	Structure of ReO _x Clusters Attached on the Ir Metal Surface in Ir-ReO _x /SiO ₂ for the Hydrogenolysis Reaction
			2011B1095	BL01B1	奥村 和	
25335	Arumugam Murugadoss	116 (2012) 26776-26783	2012A1089	BL01B1	奥村 和	Bimetallic AuPd Nanocluster Catalysts with Controlled Atomic Gold Distribution for Oxidative Dehydrogenation of Tetralin
			2011B1095	BL01B1	奥村 和	

Journal of the American Chemical Society

23935	Devrani Mitra	135 (2013) 2530-2543	2011B0032	BL09XU	Cramer Stephen	Characterization of [4Fe-4S] Cluster Dynamics and Structure in Nitrogenase Fe Protein at Three Oxidation Levels via Combined NRVS, EXAFS and DFT Analysis
			2012A0032	BL09XU	Cramer Stephen	
25275	Itaru Osaka	135 (2013) 8834-8837	2012B1728	BL19B2	尾坂 格	Naphthodithiophene-Naphthobisthiadiazole Copolymers for Solar Cells: Alkylation Drives the Polymer Backbone Flat and Promotes Efficiency
25475	Bin Dong	135 (2013) 14797-14805	2012A1345	BL40B2	前田 大光	Ion-Based Materials Derived from Positively and Negatively Charged Chloride Complexes of π -Conjugated Molecules

Science

24534	Satoru Nakatsuji	336 (2012) 559-562	2010B0083	BL02B1	澤 博	Spin-Orbital Short-Range Order on a Honeycomb-Based Lattice
			2011A0083	BL02B1	澤 博	
			2011B0083	BL02B1	澤 博	
25087	Yoko Sakata	339 (2013) 193-196	2011A1671	BL13XU	北川 進	Shape-Memory Nanopores Induced in Coordination Frameworks by Crystal Downsizing
25215	Yuzuru Itoh	340 (2013) 75-78	2011B1005	BL41XU	山本 雅貴	Decameric SelA · tRNA ^{Sec} Ring Structure Reveals Mechanism of Bacterial Selenocysteine Formation

Scientific Reports

25066	Atsunobu Masuno	3 (2013) 3010	2008B0096	BL02B2	西堀 英治	Stabilization of Metastable Ferroelectric Ba _{1-x} Ca _x Ti ₂ O ₅ by Breaking Ca-site Selectivity via Crystallization from Glass
			2008B1040	BL02B2	増野 敦信	
			2009A0084	BL02B2	久保田 佳基	
25592	Hirokazu Masai	3 (2013) 3541	2011B1193	BL01B1	正井 博和	Narrow Energy Gap between Triplet and Singlet Excited States of Sn ²⁺ in Borate Glass
25611	Hirokazu Fukidome	4 (2013) 3713	2011A1646	BL17SU	吹留 博一	Orbital-specific Tunability of Many-Body Effects in Bilayer Graphene by Gate Bias and Metal Contact
			2011B1877	BL17SU	吹留 博一	
			2012A1626	BL17SU	吹留 博一	

Acta Materialia

25196	Hiroyuki Toda	61 (2013) 5535-5548	2005B0019	BL47XU	戸田 裕之	Grain Boundary Tracking: A Four-Dimensional Visualization Technique for Determining Grain Boundary Geometry via Local Strain Mapping
			2007B1213	BL20XU	小林 正和	
			2008A1498	BL20XU	小林 正和	
			2009A1554	BL20XU	小林 正和	
25197	Hiroyuki Toda	61 (2013) 2403-2413	2009A1213	BL47XU	戸田 裕之	Cavitation during High-Temperature Deformation in Al-Mg Alloys
			2010A1172	BL20XU	戸田 裕之	

Angewandte Chemie International Edition

24994	Tomohiro Agou	52 (2013) 10818-10821	2012A1285	BL38B1	畠山 琢次	Synthesis of a Dialimene-Benzene Adduct and Its Reactivity as a Synthetic Equivalent of a Dialumene
			2012B1194	BL38B1	畠山 琢次	
25313	Eiichi Kayahara	52 (2013) 13722-13726	2013A1705	BL40XU	高谷 光	Isolation and Characterization of the Cycloparaphenylene Radical Cation and Dication
			2012B1815	BL40XU	高谷 光	
			2012A1625	BL40XU	高谷 光	
			2011B1545	BL40XU	高谷 光	
			2012A1161	BL40XU	安田 伸広	
			2011B1181	BL40XU	安田 伸広	

Applied Physics Express

25148	Sousuke Abe	6 (2013) 115701	2011A3876	BL23SU	大野 真也	Characterization of the Monolayer Oxide Formation Processes on High-Index Si Surface by Photoelectron Spectroscopy with Synchrotron Radiation
			2011B3875	BL23SU	大野 真也	
			2012A3809	BL23SU	大野 真也	
25413	Takao Ochiai	6 (2013) 102001	2010B1744	BL40B2	磯崎 勝弘	Plasmon-Resonant Optics on an Indium-Tin-Oxide Film for Exciting a Two-Photon Photochromic Reaction
			2012A1575	BL40B2	田口 知弥	

Biochemical and Biophysical Research Communications

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25180	Koji Yamamoto	440 (2013) 762-767	2012B6756	BL44XU	山本 幸治	New Insights into the Catalytic Mechanism of <i>Bombyx mori</i> Prostaglandin E Synthase Gained from Structure-Function Analysis
			2012A6756	BL44XU	山本 幸治	
25432	Takeshi Hayashi	435 (2013) 28-33	2005B0417	BL38B1	田中 勲	Structural and Genomic DNA Analysis of a Putative Transcription Factor SCO5550 from <i>Streptomyces coelicolor</i> A3(2): Regulating the Expression of Gene <i>sco5551</i> as a Transcriptional Activator with a Novel Dimer Shape

Biochemistry

25373	Partha Pratim Parui	52 (2013) 8732-8744	2012B6720	BL44XU	小森 博文	Formation of Oligomeric Cytochrome c during Folding by Intermolecular Hydrophobic Interaction between N-C-terminal α -Helices
25588	Ryo Uehara	52 (2013) 9080-9088	2013A6813	BL44XU	金谷 茂則	Formation of the High-Affinity Calcium Binding Site in Pro-subtilisin E with the Insertion Sequence IS1 of Pro-Tk-subtilisin

Chemistry Letters

21943	Tatsuyuki Tsubo	41 (2012) 783-785	2011A1059	BL38B1	小出 芳弘	Structure Determination of the Cobalt(III) Complex Catalyst for Enantioselective Borohydride Reduction
25440	Eiichi Kayahara	42 (2013) 621-623	2012B1790	BL02B1	山子 茂	Selective Synthesis of [6], [8], and [10] Cycloparaphenylenes

ChemSusChem

25265	Masahiro Murase	5 (2012) 2307-2311	2010B1800	BL46XU	駒場 慎一	Crop-Derived Polysaccharides as Binders for High-Capacity Silicon/Graphite-Based Electrodes in Lithium-Ion Batteries
			2011B1031	BL46XU	駒場 慎一	
25575	Youtaro Ohmi	6 (2013) 2259-2262	2012B1610	BL01B1	西村 俊	Synthesis of α -amino Acids from Glucosamine-HCL and its Derivatives by Aerobic Oxidation in Water Catalyzed by Au Nanoparticles on Basic Supports

Crystal Growth & Design

25199	Misa Sugino	13 (2013) 4986-4992	2012A1592	BL38B1	杉野 光彩	Elucidation of Anthracene Arrangement for Excimer Emission at Ambient Conditions
			2013A1617	BL38B1	杉野 光彩	
25405	Takatsugu Endo	13 (2013) 5383-5390	2012A1315	BL02B2	遠藤 太佳嗣	Determination of Missing Crystal Structures in the 1-Alkyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate Series: Implications on Structure-Property Relationship

ECS Journal of Solid State Science and Technology

25361	Haruka Yamazaki	3 (2014) Q20-Q22	2012B1663	BL25SU	上岡 義弘	The Influence of Fluorinated Silicon Nitride Gate Insulator on Positive Bias Stability toward Highly Reliable Amorphous InGaZnO Thin-Film Transistors
25455	Naoto Kitamura	2 (2013) N211-N216	2011A1853	BL19B2	井手本 康	Relationship between Ferroelectric Performance, Crystal and Electronic Structures in SrBi ₂ (Ta _{1-x} Nb _x) _{1.95} M _{0.05} O ₉ (M =W, Mo)

FEBS Letters

25067	Shin Muraoka	586 (2012) 1715-1718	2006A1786	BL41XU	村岡 真	Crystal Structures of the State 1 Conformations of the GTR-bound H-Ras Protein and its Oncogenic G12V and Q61L Mutants
25298	Kiyohito Kihira	586 (2012) 3705-3709	2008B1729	BL38B1	木平 清人	Crystal Structure Analysis of the Translation Factor RF3 (Release Factor 3)

Few-Body Systems-1

25106	Sanghoon Hwang	54 (2013) 1037-1041	2007A6001	BL33LEP	堀田 智明	$K^{\circ}\Sigma^+$ Photoproduction with Evidence for the Kappa Messon Exchange at SPring-8/LEPS
-------	----------------	------------------------	-----------	---------	-------	--

Few-Body Systems-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25108	Norihito Muramatsu	54 (2013) 997-1003	2006A6001	BL33LEP	堀田 智明	Recent Progress and Results of LEPS, LEPS2, and ELPH
			2006B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2008A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2008B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2009A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2009B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2010A6001	BL33LEP	堀田 智明	
2010B6001	BL33LEP	堀田 智明				

Geophysical Research Letters

25007	Haruka Ozawa	40 (2013) 4845-4849	2010A0087	BL10XU	廣瀬 敬	Decomposition of Fe ₃ S above 250 GPa
			2011A0087	BL10XU	廣瀬 敬	
			2012B0087	BL10XU	廣瀬 敬	
25126	Chie Kato	40 (2013) 5085-5088	2012A0087	BL10XU	廣瀬 敬	NAL Phase in K-rich Portion of the Lower Mantle
			2012B0087	BL10XU	廣瀬 敬	

The Journal of Chemical Physics

25333	Isao H. Suzuki	139 (2013) 174314	2012A1067	BL27SU	長岡 伸一	Site-Dependent Si $KL_{23}L_{23}$ Resonant Suger Electron Spectra Following Inner-Shell Excitation of Cl ₃ SiSi(CH ₃) ₃
25427	Takehiko Tanaka	139 (2013) 104701	2009B1072	BL10XU	平井 寿子	Phase Changes of Filled Ice Ih Methane Hydrate under Low Temperature and High Pressure
			2010A1091	BL10XU	平井 寿子	
			2011A1778	BL10XU	平井 寿子	

Journal of Power Sources

25149	Okie Sekizawa	196 (2011) 6651-6656	2009B1807	BL19B2	伊藤 孝憲	Crystal and Electronic Structure Change Determined by Various Method for Delithiation Process of Li _x (Ni,Mn)O ₂ -based Cathode Material
25150	Hidesato Saruwatari	196 (2011) 10126-10132	2009B1807	BL19B2	伊藤 孝憲	Effects of Supersonic Treatment on the electrochemical Properties and Crystal Structure of LiMn _{1.5} Ni _{0.5} O ₄ as a Cathode Material for Li Ion Batteries

Journal of the Ceramic Society of Japan

24987	Ikuya Yamada	121 (2013) 912-914	2013A1043	BL02B2	山田 幾也	Direct Observation of Negative Thermal Expansion in SrCu ₃ Fe ₂ O ₁₂
25152	Hidesato Saruwatari	120 (2012) 175-180	2011A1853	BL19B2	井手本 康	Investigation of Supersonic-Wave Treatment Effect on LiNi _{0.60} Co _{0.22} Mn _{0.18} O ₂ as a Cathode Material of Li Ion Battery

Materials Science Forum

25209	Mutsumi Sano	772 (2014) 123-127	2010B1403	BL02B1	佐野 睦	Plastic Strain of GlidCop for Materials of High Heat Load Components
25229	Jun-ichi Shibano	768-769 (2014) 358-365	2010B1540	BL28B2	柴野 純一	Study on Ductile Damage Progress of an Aluminum Single Crystal Using Synchrotron White X-ray
			2011B1189	BL28B2	柴野 純一	

繊維学会誌 (Sen'i Gakkaishi)

23961	Masayoshi Okuyama	68 (2012) 59-63	2006A1765	BL43IR	奥山 誠義	Basic Studies on the Identification of Excavated Archaeological Textile Fibers Using Polarized FT-IR Micro-spectroscopy : The Identification of Bast Fibers
			2007A1306	BL43IR	奥山 誠義	
			2007B1364	BL43IR	奥山 誠義	
			2008A1442	BL43IR	奥山 誠義	
			2009A1301	BL43IR	奥山 誠義	
			2009B1489	BL43IR	奥山 誠義	
			2006A1030	BL43IR	佐藤 昌憲	
			2007A1045	BL43IR	佐藤 昌憲	
23962	Masayoshi Okuyama	68 (2012) 55-58	2009A1301	BL43IR	奥山 誠義	The Study on Excavated Bast Fibers Using Synchrotron Polarized FT-IR Micro-Spectroscopy
			2009B1489	BL43IR	奥山 誠義	

ACS Macro Letters

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
21202	Itaru Osaka	1 (2012) 437-440	2011B1860	BL19B2	尾坂 格	Naphthodithiophene-Based Donor–Acceptor Polymers: Versatile Semiconductors for OFETs and OPVs

Acta Crystallographica Section B

25202	Toshiyuki Matsunaga	68 (2012) 559-570	2011B0030	BL40XU	山田 昇	Structural Transformation of Sb-based High-Speed Phase-Change Materials
			2010B1827	BL02B2	松永 利之	
			2010B0084	BL02B2	久保田 佳基	

Advanced Functional Materials

25329	Clara Guglieri	23 (2013) Online published 2 Dec. 2013	2011B1700	BL25SU	Chaboy Jesus	Evidence of Oxygen Ferromagnetism in ZnO Based Materials
			2011B3873	BL23SU	Chaboy Jesus	
			2012A0024	BL39XU	Chaboy Jesus	
			2009B0024	BL39XU	Chaboy Jesus	

Advanced Materials

25276	Itaru Osaka	26 (2014) 331-338	2012A1611	BL19B2	尾坂 格	Thiophene-Thiazolothiazole Copolymers: Significant Impact of Side Chain Composition on Backbone Orientation and Solar Cell Performances
-------	-------------	----------------------	-----------	--------	------	---

Advanced Optical Materials

25201	Noboru Yamada	1 (2013) 820-826	2010A0030	BL40XU	山田 昇	Phase-Change Nanodot Material for an Optical Memory
			2010B0030	BL40XU	山田 昇	
			2011A0030	BL40XU	山田 昇	
			2011B0030	BL40XU	山田 昇	
			2012A0030	BL40XU	山田 昇	
			2012B0030	BL40XU	山田 昇	

Advances in Materials Science and Engineering

25072	Yutaka Moritomo	2013 (2013) 967285	2011B1066	BL02B2	守友 浩	Synchrotron-Radiation X-ray Investigation of Li ⁺ /Na ⁺ Interaction into Prussian Blue Analogues
			2012A1094	BL02B2	守友 浩	
			2011A1418	BL02B2	守友 浩	
			2010B1063	BL02B2	守友 浩	

American Mineralogist

25000	Shuangmeng Zhai	98 (2013) 1811-1816	2011A1072	BL04B1	Zhai Shuangmeng	<i>P-V-T</i> Relations of γ -Ca ₃ (PO ₄) ₂ Tuite Determined by in situ X-ray Diffraction in a Large-Volume High-Pressure Apparatus
			2012A1139	BL04B1	Zhai Shuangmeng	

APL Materials

24971	Hiroyuki Saitoh	1 (2013) 032113	2011B3602	BL14B1	齋藤 寛之	Synthesis and Formation Process of Al ₂ CuH _x : A New Class of Interstitial Aluminum-Based Alloy Hydride
			2012B3602	BL14B1	齋藤 寛之	

Applied and Environmental Microbiology

25428	Ken'ichiro Matsumoto	79 (2013) 6134-6139	2010B1460	BL41XU	田中 良和	Directed Evolution and Structural Analysis of NADPH-Dependent Acetoacetyl Coenzyme A (Acetoacetyl-CoA) Reductase from <i>Ralstonia eutropha</i> Reveals Two Mutations Responsible for Enhanced Kinetics
-------	----------------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

Applied Catalysis A: General

25296	Akiyuki Hamasaki	469 (2014) 146-152	2010B1006	BL14B2	春田 正毅	Cooperative Catalysis of Palladium Nanoparticles and Cobalt Oxide Support for Formylation of Aryl Iodides under Syngas Atmosphere
-------	------------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

Applied Catalysis B

25032	Motoharu Morikawa	144 (2014) 561-569	2011A1977	BL01B1	泉 康雄	Photoconversion of Carbon Dioxide in Zinc–Copper–Gallium Layered Double Hydroxides: the Kinetics to Hydrogen Carbonate and Further to CO/Methanol
-------	-------------------	-----------------------	-----------	--------	------	---

Applied Mechanics and Materials

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25033	Tadashi Kato	423-426 (2013) 271-275	2010A1458	BL08W	桜井 浩	Perpendicular Magnetic Anisotropy in Fe/MgO Multilayer Films Measured by Magnetic Compton Scattering
			2011A1115	BL08W	桜井 浩	

Atmospheric Chemistry and Physics

25103	Yoshio Takahashi	13 (2013) 7695-7710	2012A1240	BL37XU	高橋 嘉夫	Seasonal Changes in Fe Species and Soluble Fe Concentration in the Atmosphere in the Northwest Pacific Region Based on the Analysis of Aerosols Collected in Tsukuba, Japan
			2012B1428	BL01B1	高橋 嘉夫	

Biochimica et Biophysica Acta

25564	Andrew Njagi Mugo	1834 (2013) 953-963	2009A1168	BL38B1	三上 文三	Crystal Structure of Pyridoxine 4-oxidase from <i>Mesorhizobium loti</i>
			2008B1522	BL38B1	三上 文三	

Bulletin of the Chemical Society of Japan

25517	Michiyasu Sakagami	86 (2013) 1132-1143	2011B1545	BL40XU	高谷 光	1,2-Bis(ferrocenyl)disnictenes: Bimetallic Systems with a Pn=Pn Heavy π -Spacer (Pn: P, Sb, and Bi)
-------	--------------------	------------------------	-----------	--------	------	---

Carbohydrate Polymers

25478	Shiho Suzuki	99 (2014) 432-437	2011B1277	BL40B2	湯口 宜明	Conformation and Physical Properties of Cycloisomaltooligosaccharides in Aqueous Solution
			2012A1261	BL40B2	湯口 宜明	

Catalysis Science & Technology

25295	Xiaohao Liu	3 (2013) 3000-3006	2009B1007	BL14B2	春田 正毅	Gold Nanoparticles Assisted Formation of Cobalt Species for Intermolecular Hydroaminomethylation and Intramolecular Cyclocarbonylation of Olefins
-------	-------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

ChemCatChem

24992	Lingsheng Wang	5 (2013) 2203-2206	2009A1052	BL01B1	唯 美津木	Direct Synthesis of Phenol from Benzene and O ₂ , Regulated by NH ₃ on Py/ β and Pt/Re/ZSM-5 Catalysts
			2011A1343	BL40XU	岩澤 康裕	

Chemical Communications

25205	Kohsuke Mori	49 (2013) 10468-10470	2012B1058	BL01B1	森 浩亮	Positive Effects of the Residual Templates within the MCM-41 Mesoporous Silica Channels in the Metal-Catalyzed Reactions
			2012A1061	BL01B1	森 浩亮	

Chemical Physics

24040	Yohko Yano	419 (2013) 153-155	2011B1207	BL37XU	矢野 陽子	Effect of Salt Ions on Protein Layers at the Air-Water Interface under a Crystallization Condition
-------	------------	-----------------------	-----------	--------	-------	--

Chemical Physics Letters

24967	Kazuhiro Mori	584 (2013) 113-118	2012B1298	BL04B2	森 一広	Visualization of Conduction Pathways in Lithium Superionic Conductors: Li ₂ S-P ₂ S ₅ Glasses and Li ₇ P ₃ S ₁₁ Glass-Ceramic
-------	---------------	-----------------------	-----------	--------	------	---

Chemistry - An Asian Journal

25472	Yuuya Bando	8 (2013) 2088-2095	2012A1345	BL40B2	前田 大光	Corannulene-Fused Anion-Responsive p-Conjugated Molecules that Form Self-Assemblies with Unique Electronic Properties
-------	-------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

Chemistry of Materials

22651	Itaru Osaka	24 (2012) 1235-1243	2011B1860	BL19B2	尾坂 格	Quinacridone-Based Semiconducting Polymers: Implication of Electronic Structure and Orientational Order for Charge Transport Property
-------	-------------	------------------------	-----------	--------	------	---

Chemosphere

25194	Mahtab Ahmad	95 (2014) 433-441	2009A1255	BL01B1	橋本 洋平	Speciation and Phytoavailability of Lead and Antimony in a Small Arms Range Soil Amended with Mussel Shell, Cow Bone and Biochar: EXAFS Spectroscopy and Chemical Extractions
			2010B1306	BL01B1	橋本 洋平	
			2012B1327	BL01B1	橋本 洋平	

ChemPhysChem

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
24875	Masashi Nakamura	14 (2013)	2011A1119	BL13XU	中村 将志	Effect of Non-Specifically Adsorbed Ions on the Surface Oxidation of Pt(111)
		2426-2431	2011B1134	BL13XU	中村 将志	

Colloid and Polymer Science

25444	Masatoshi Tosaka	291 (2013) 2719-2724	2010B1215	BL40XU	登阪 雅聡	Strain- and Temperature-Induced Polymorphism of Poly(dimethylsiloxane)
			2012A1044	BL40XU	登阪 雅聡	
			2013A1203	BL40XU	登阪 雅聡	

Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects

24990	Youhei Kawabata	441 (2014) 140-148	2011B1052	BL45XU	川端 庸平	Bilayer Structure of Ester-Amide-Type Cationic Surfactants in a Dilute Aqueous Solution
-------	-----------------	-----------------------	-----------	--------	-------	---

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology

25160	Jiayi Tang	11 (2013) 116-121	2012A3808	BL23SU	小川 修一	SiO Desorption Kinetics of Si(111) Surface Oxidation Studied by Real-Time Photoelectron Spectroscopy
			2013A3874	BL23SU	小川 修一	

Electrochemistry Communications

25266	Hiroaki Yoshida	34 (2013) 60-63	2011B1729	BL02B2	駒場 慎一	NaFe _{0.5} Co _{0.5} O ₂ as High Energy and Power Positive Electrode for Na-ion Batteries
-------	-----------------	--------------------	-----------	--------	-------	---

EPJ Web of Conferences

25064	Rosantha Kumara	15 (2011) 02007	2008B1601	BL04B2	川北 至信	Local Structure of Superionic Glass Ag _x (GeSe ₃) _{1-x} , x=0.565
			2009A1585	BL04B2	川北 至信	

The FASEB Journal

25256	Julien Ochala	28 (2014) 408-415	2011B1058	BL45XU	Ochala Julien	Pointed-end Capping by Tropomodulin Modulates Actomyosin Crossbridge Formation in Skeletal Muscle Fibers
-------	---------------	----------------------	-----------	--------	---------------	--

Food Chemistry

25568	Mary Rose Tandang-Silvas	135 (2012) 819-826	2009B1399	BL38B1	三上 文三	Crystal Structure of a Major Seed Storage Protein, 11S Proglobulin, from <i>Amaranthus hypochondriacus</i> : Insight into its Physico-Chemical Properties
			2009B6935	BL44XU	三上 文三	

Genes and Development

25171	Toru Sengoku	25 (2011) 2266-2277	2006A1494	BL41XU	仙石 徹	Structural Basis for Histone H3 Lys 27 Demethylation by UTX/KDM6A
-------	--------------	------------------------	-----------	--------	------	---

Geochimica et Cosmochimica Acta

25104	Ryoichi Nakada	121 (2013) 105-119	2010B1347	BL01B1	高橋 嘉夫	Difference in the Stable Isotopic Fractionations of Ce, Nd, and Sm during Adsorption on Iron and Manganese Oxides and its Interpretation Based on Their Local Structures
			2010B1295	BL01B1	高橋 嘉夫	
			2011B1279	BL01B1	高橋 嘉夫	
			2011A1830	BL14B2	高橋 嘉夫	

International Journal of Hydrogen Energy

23730	Tessui Nakagawa	38 (2013) 6744-6749	2008A1557	BL02B2	坪田 雅己	Microstructure and Hydrogen Desorption Characteristics of Hydrogenated ScH ₂ -MB _n (M = Mg and Ca) Systems Synthesized by Mechanical Milling
			2007B1834	BL14B2	市川 貴之	

International Journal of Modern Physics

25113	Kenneth Hicks	19 (2010) 2363-2368	2006A6001	BL33LEP	堀田 智明	Photoproduction of the Σ^- Resonance from the Neutron
			2006B6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007A6001	BL33LEP	堀田 智明	
			2007B6001	BL33LEP	堀田 智明	

Journal of Catalysis

25002	Hiroaki Nishikawa	307 (2013) 254-264	2011A1003	BL14B2	春田 正毅	Promotional Effect of Au on Reduction of Ni(II) to Form Au-Ni Alloy Catalysts for Hydrogenolysis of Benzylic Alcohols
			2011B1001	BL14B2	春田 正毅	
			2012A1454	BL14B2	大橋 弘範	

Journal of Materials Science

研究成果番号	著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25453	Naoto Kitamura	47 (2012) 6220-6225	2011A1853	BL19B2	井手本 康	Particle Morphology, Electrical Conductivity, Crystal and Electronic Structures of Hydrothermally Synthesized (Ce,Sr)PO ₄

Journal of Photopolymer Science and Technology

25541	Kenji Sekiguchi	26 (2013) 327-332	2010A1090	BL40B2	安藤 慎治	Thermal Expansion Behavior of the Ordered Domain in Polyimide Films Investigated by Variable Temperature WAXD Measurements
			2011A1237	BL40B2	安藤 慎治	

Journal of Structural Biology

25158	Ryuta Mizutani	184 (2013) 271-279	2007B1102	BL20XU	水谷 隆太	Three-Dimensional Network of <i>Drosophila</i> Brain Hemisphere
			2008A1190	BL47XU	水谷 隆太	
			2008B1261	BL47XU	水谷 隆太	
			2011B0041	BL47XU	水谷 隆太	
			2012B0041	BL47XU	水谷 隆太	

Journal of the Electrochemical Society

25151	Yasushi Idemoto	159 (2012) A673-A677	2011A1974	BL14B2	井手本 康	Average and Local Structure Analyses of Li(Mn _{1/3} Ni _{1/3} Co _{1/3-x} Al _x)O ₂ Using Neutron and Synchrotron X-ray Sources
-------	-----------------	-------------------------	-----------	--------	-------	--

Key Engineering Materials

25599	Kosuke Suzuki	596 (2014) 8-14	2011B1516	BL08W	桜井 浩	Study of Perpendicular Magnetic Anisotropy in Co/Au Multilayer Probed by Magnetic Compton Profile
-------	---------------	--------------------	-----------	-------	------	---

Langmuir

25415	Hui Wu	29 (2013) 14971-14975	2012B1482	BL20XU	高原 淳	Robust Liquid Marbles Stables with Surface-Modified Halloysite Nanotubes
-------	--------	--------------------------	-----------	--------	------	--

Materials Science in Semiconductor Processing

23586	Hideyuki Yamazaki	15 (2012) 707-712	2006B5060	BL16XU	山崎 英之	Direct Observation of Local Atomic Structure in Arsenic Implanted Silicon
			2007A5060	BL16XU	山崎 英之	
			2008B5060	BL16XU	山崎 英之	

Metal-Molecular Assembly for Functional Materials

25300	Hikaru Takaya	(2013) 49-60	2012A1161	BL40XU	安田 伸広	Metal Array Fabrication Based on the Self-Organization of Metalated Amino Acids and Peptides
			2011B1181	BL40XU	安田 伸広	
			2011A1614	BL40B2	尾形 和樹	
			2012B1737	BL14B2	高谷 光	
			2012B1815	BL40XU	高谷 光	
			2012A1625	BL40XU	高谷 光	
			2012A1595	BL14B2	高谷 光	
			2011B1545	BL40XU	高谷 光	
			2011B1945	BL14B2	高谷 光	

Metallurgical and Materials Transactions A

25366	Guang Zeng	45 (2014) 918-926	2011B1048	BL20XU	野北 和宏	Solidification of Sn-0.7Cu-0.15Zn Solder: <i>In-situ</i> Observation
			2012B1440	BL37XU	野北 和宏	

Molecular and Cellular Biology

25284	Chafen Lu	30 (2010) 5432-5443	2000B0606	BL41XU	濡木 理	Structural Evidence for Loose Linkage between Ligand Binding and Kinase Activation in the Epidermal Growth Factor Receptor
-------	-----------	------------------------	-----------	--------	------	--

Molecular Cell

25285	Shiho Chiba	39 (2010) 410-420	2006B1766	BL41XU	関根 俊一	Structural Basis for the Major Role of <i>O</i> -Phosphoseryl-tRNA Kinase in the UGA-Specific Encoding of Selenocysteine
-------	-------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

Molecules and Cells

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25577	Byung Gil Lee	32 (2011) 589-595	2011A6686	BL44XU	Song Hyun Kyu	Structural Insights into the Conformational Diversity of ClpP from <i>Bacillus subtilis</i>

Nano Letters

25540	Yukio Takahashi	13 (2013) 6028-6032	2012A8001	BL3	高橋 幸生	Coherent Diffraction Imaging Analysis of Shape-Controlled Nanoparticles with Focused Hard X-ray Free-Electron Laser Pulses
			2012B8037	BL3	中迫 雅由	
			2013A8043	BL3	中迫 雅由	

Nature Communications

25226	Eiichi Kayahara	4 (2013) 2694	2013A1661	BL02B1	山子 茂	Synthesis and Physical Properties of a Ball-Like Three-Dimensional π -conjugated Molecule
			2012B1790	BL02B1	山子 茂	
			2013A1705	BL40XU	高谷 光	
			2012B1815	BL40XU	高谷 光	
			2012A1625	BL40XU	高谷 光	

Organic Letters

25282	Hiroshi Danjo	15 (2013) 2164-2167	2012B1136	BL38B1	檀上 博史	Preparation of Tris(spiroorthocarbonate) Cyclophanes as Back to Back Ditopic Hosts
-------	---------------	------------------------	-----------	--------	-------	--

Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology

25591	Ryoichi Nakada	393 (2014) 61-75	2012B1221	BL01B1	高橋 嘉夫	Late Triassic Compositional Changes of Aeolian Dusts in the Pelagic Panthalassa: Response to the Continental Climatic Change
			2013A1613	BL01B1	菊池 早希子	
			2013B1658	BL01B1	中田 亮一	

Physica C

25146	Yasushi Idemoto	469 (2009) 2003-2007	2007A1890	BL02B2	伊藤 孝憲	Dependence of Property, Crystal Structure and Electric Conductivity on Substitution Content and Synthetic Process of $T^{1-}La_{2-x}RE_xCuO_{4-\delta}$ (RE=Sm and Tb)
			2008B2060	BL19B2	伊藤 孝憲	

Physica Status Solidi - Rapid Research Letters

25075	Daiki Tanabe	7 (2013) 1097-1101	2012B1753	BL02B2	小林 航	Na-Site Energy of P2-Type Na_xMO_2 ($M = Mn$ and Co)
			2013A1649	BL02B2	守友 浩	

Physica Status Solidi C

25155	Takuo Sasaki	10 (2013) 1640-1643	2011A3573	BL11XU	山口 真史	Defect Characterization in Compositionally Graded InGaAs Layers on GaAs(001) Grown by MBE
			2011B3573	BL11XU	山口 真史	

Physical Chemistry and Chemical Physics

24980	Martin Martis	15 (2013) 11766-11774	2010B1608	BL04B2	Sankar Gopinathan	Tracking the Structural Changing in Pure and Heteroatom Substituted Aluminophosphate, AIPO-18 Using Synchrotron Based X-ray Diffraction Techniques
			2011B1117	BL04B2	Sankar Gopinathan	

Physics of the Earth and Planetary Interiors

25289	Shigeaki Ono	224 (2013) 32-37	2010B1065	BL10XU	小野 重明	Equation of State and Elasticity of B2-type FeSi: Implications for Silicon in the Inner Core
			2011B1442	BL10XU	小野 重明	

PLoS One

25159	Koji Yonekura	8 (2013) e78216	2011B1172	BL32XU	米倉 功治	Post-Transcriptional Regulator Hfq Binds Catalase HPII: Crystal Structure of the Complex
			2011B2072	BL32XU	米倉 功治	

Polymer Journal

25043	Ryohei Ishige	45 (2013) 1041-1046	2011A1467	BL02B2	高原 淳	Structural Analysis and Surface Wettability of a Novel Alternated Vinylidene Cyanide with Fluorinated Vinyl Ether Copolymer
			2011A7299	BL03XU	高原 淳	
			2011B1427	BL02B2	高原 淳	

Proceedings of SPIE

25386	Yoshio Suzuki	8851 (2013) 885109	2012A1270	BL37XU	鈴木 芳生	Development of Large-Field High-Resolution Hard X-ray Imaging Microscopy and Microtomography with Fresnel Zone Plate Objective
			2013A1384	BL37XU	鈴木 芳生	

Proceedings of the 10th International Symposium on Agglomeration

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25099	Ryohei Mise	(2013)	2013A1187	BL37XU	野口 修治	Preparation of Fine Core Particles Applied for Coating Process Using Rotogranulation
			2012A1670	BL37XU	板井 茂	

Proceedings of The 12th Asian Textile Conference

25339	Yuta Chonan	(2013) 220-224	2012A1107	BL40B2	松葉 豪	Crystal Structure Analysis for Polyurea
			2013A1164	BL43IR	松葉 豪	

Proceedings of the 46th International Symposium on Microelectronics

25090	Keishiro Okamoto	(2013) 000104-000108	2013A5110	BL16XU	淡路 直樹	Effects of Sb and Zn Addition on Impact Resistance Improvement of Sn-Bi Solder Joints
			2012B5110	BL16XU	淡路 直樹	
			2012A5110	BL16XU	淡路 直樹	

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America

25118	Shunsuke Matsumoto	110 (2013) 17868-17873	2011A6619	BL44XU	神田 大輔	Crystal Structures of an Archaeal Oligosaccharyltransferase Provide Insights into the Catalytic Cycle of N-linked Protein Glycosylation
			2011B6619	BL44XU	神田 大輔	
			2012A6719	BL44XU	神田 大輔	
			2012B6719	BL44XU	神田 大輔	
			理研	BL32XU		

Protein Science

25208	Kota Yuzaki	22 (2013) 1711-1721	2012A6612	BL44XU	金谷 茂則	Increase in Activation Rate of Pro-Tk-subtilisin by a Single Nonpolar-to-polar Amino Acid Substitution at the Hydrophobic Core of the Propeptide Domain
-------	----------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics

25114	Mitsuo Kuratani	79 (2011) 2065-2075	2011A1004	BL41XU	山本 雅樹	Crystal Structure of <i>Sulfolobus tokodaii</i> Sua5 Complexed with L-threonine and AMPNP
-------	--------------------	------------------------	-----------	--------	-------	---

Review of Scientific Instruments

25218	Hiroshi Fukui	84 (2013) 113902	2010B1206	BL35XU	福井 宏之	A Compact System for Generating Extreme Pressure and Temperatures: An Application of Laser-Heated Diamond Anvil Cell to Inelastic X-ray Scattering
			2011A1452	BL35XU	福井 宏之	
			2012A1255	BL35XU	大谷 栄治	
			2012B1439	BL35XU	大谷 栄治	

Solid State Ionics

25044	Takashi Tsuchiya	253 (2013) 110-118	2010A4605	BL15XU	寺部 一弥	Direct Observation of Redox State Modulation at Carbon/Amorphous Tantalum Oxide Thin Film Hetero-Interface Probed by Means of <i>in situ</i> Hard X-ray Photoemission Spectroscopy
			2010B4602	BL15XU	寺部 一弥	

Synlett

25260	Hikaru Takaya	24 (2013) 1910-1914	2012B1109	BL02B1	安田 伸広	Synthesis, Structure, and Function of PCP Pincer Transition-Metal-Complex-Bound Norvaline Derivatives
			2012B1790	BL02B1	山子 茂	
			2011B1545	BL40XU	高谷 光	
			2012A1161	BL40XU	安田 伸広	
			2012A1625	BL40XU	高谷 光	
			2012B1815	BL40XU	高谷 光	

X-Ray Spectrometry

25047	Hisashi Hayashi	42 (2013) 450-455	2012B1130	BL39XU	林 久史	Chemical Effects of High-Resolution Yb _{L_{γ4}} Emission Spectra: a Possible Probe for Chemical Analysis
-------	--------------------	----------------------	-----------	--------	------	---

軽金属 (Journal of Japan Institute of Light Metals)

25195	Masakazu Kobayashi	63 (2013) 273-278	2007A1618	BL47XU	戸田 裕之	Relationship between Resolution and Rotation Stage in Imaging X-ray CT
-------	-----------------------	----------------------	-----------	--------	-------	--

高圧力の科学と技術 (The Review of High Pressure Science and Technology)

25217	Kenji Ohwada	23 (2013) 245-251	2009A3713	BL22XU	大和田 謙二	Coherent X-ray Scattering Study of Relaxor Ferroelectrics
			2009B3713	BL22XU	大和田 謙二	
			2010A3713	BL22XU	大和田 謙二	
			2010B3713	BL22XU	大和田 謙二	

材料 (Journal of the Society of Materials Science, Japan)

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	実験責任者	タイトル
25228	Jun-ichi Shibano	62 (2013)	2011B1189	BL28B2	柴野 純一	Study of Evaluation of Ductile Damage of Aluminum Single Crystal Using Synchrotron White X-Ray
		443-450	2010B1540	BL28B2	柴野 純一	

炭素 (Tanso)

25452	Toshihiko Fujimori	2013 (2013)	2012B1064	BL02B2	藤森 利彦	Synthesis of One-Dimensional Metallic Sulfur inside the Nano-Confined Spaces of Carbon Nanotubes
		292-296	2011B1559	BL02B2	瓜田 幸幾	

日本結晶学会誌 (Journal of the Crystallographic Society of Japan)

24470	Taro Tamada	55 (2013) 47-51	2010A1921	BL38B1	玉田 太郎	Structure of Enzyme-Inhibitor Complex Determined by Neutron Crystallography
-------	----------------	--------------------	-----------	--------	-------	--

日本材料学会 第 31 回 疲労シンポジウム 講演論文集

25016	Kiyotaka Masaki	(2012)	2011A1685	BL19B2	佐野 雄二	Fatigue Crack Observation of Friction Stir Welded Joints by Synchrotron Radiation and Industrial X-ray
			2011B1861	BL19B2	佐野 雄二	
			2012A1274	BL19B2	佐野 雄二	
			2012B1740	BL19B2	佐野 雄二	

博士論文 (茨城大学)

25230	Kazuhiro Akutsu	(2013)	2008A3504	BL11XU	塩飽 秀啓	Development of An(III)/Ln(III) Separation Reagent Using Benzimidazole-pyridine-amide Base Ligands
			2008B3504	BL11XU	塩飽 秀啓	
			2009A3504	BL11XU	池田 篤史	
			2009B3504	BL11XU	塩飽 秀啓	
			2010A3504	BL11XU	塩飽 秀啓	
			2010B3504	BL11XU	塩飽 秀啓	
			2011A3504	BL11XU	塩飽 秀啓	
2011B3504	BL11XU	塩飽 秀啓				

博士論文 (山形大学)

24965	Yunfeng Zhao	(2013)	2011A1595	BL43IR	趙 雲峰	Structural Formation under Polymer Processing Relevant Conditions
			2011B1123	BL43IR	松葉 豪	

課題以外の成果として登録された論文

Acta Crystallographica Section D

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	タイトル
25116	Noriko Handa	67 (2011) 480-487	理研	BL26B2	Structural Basis for Compound C Inhibition of the Human AMP-activated Protein Kinase $\alpha 2$ Subunit Kinase Domain
25212	Hideaki Niwa	69 (2013) 595-602	理研	BL32XU	Structures of Histone Methyltransferase SET7/9 in Complexes with Adenosylmethionine Derivatives
25225	Eun-Young Won	69 (2013) 1160-1170	理研	BL26B2	High-Resolution Crystal Structure of the Catalytic Domain of Human Dual-Specificity Phosphatase 26
			理研	BL26B1	
25283	Shankar Prasad Kanaujia	66 (2010) 821-833	理研	BL26B1	Structures of Apo and GTP-bound Molybdenum Cofactor Biosynthesis Protein MoaC from <i>Thermus thermophilus</i> HB8
			理研	BL26B2	
25466	Meiri Shida	66 (2010) 223-232	理研	BL26B2	Direct Inter-Subdomain Interactions Switch between the Closed and Open Forms of the Hsp70 Nucleotidebinding Domain in the Nucleotide-free State
25526	Jeyaraman Jeyakanthan	66 (2010) 116-124	理研	BL26B2	Free and ATP-bound Structures of Ap4A Hydrolase from <i>Aquifex aeolicus</i> V5
25562	David A. Jacques	67 (2011) 105-111	理研	BL44B2	The Structure of TTHA0988 from <i>Thermus thermophilus</i> , a Kipl-KipA Homologue Incorrectly Annotated as an Allophanate Hydrolase

Acta Crystallographica Section F

25183	Lorien Parker	68 (2012) 860-866	装置技術	BL41XU	Flexibility of the P-loop of Pim-1 Kinase: Observation of a Novel Conformation Induced by Interaction with an Inhibitor
			理研	BL26B2	
25185	Yuzuru Itoh	68 (2012) 1128-1133	装置技術	BL41XU	Crystallization and Preliminary X-ray Crystallographic Analysis of <i>Aquifex aeolicus</i> SelA, a Bacterial Selenocysteine Synthase
25464	Jeyaraman Jeyakanthan	65 (2009) 978-986	理研	BL26B1	New Structural Insights and Molecular-Modelling Studies of 4-methyl-5- β -hydroxyethylthiazole Linase from <i>Pyrococcus horikoshii</i> OT3 (PhThiK)
25525	Kavyashree Manjunath	66 (2010) 180-183	装置技術	BL12B2	Cloning, Expression, Purification, Crystallization and Preliminary X-ray Crystallographic Study of the Putative SAICAR Synthetase (PH0239) from <i>Pyrococcus horikoshii</i> OT3
25527	Jeyaraman Jeyakanthan	66 (2010) 184-186	理研	BL26B1	Expression, Purification and X-ray Analysis of 1,3-propanediol Dehydrogenase (<i>Aq_1145</i>) from <i>Aquifex aeolicus</i> VF5
25560	Yong Xie	63 (2007) 993-997	理研	BL26B1	Structure of the Minimized α/β -hydrolase Fold Protein from <i>Thermus thermophilus</i> HB8
25570	Preethi Ragunathan	69 (2013) 162-164	理研	BL26B2	Crystallization, Characterization and Preliminary X-ray Crystallographic Analysis of GK2848, a Putative Carbonic Anhydrase of <i>Geobacillus kaustophilus</i>

The Journal of Biological Chemistry

25161	Nicole Hajicek	286 (2011) 20625-20636	装置技術	BL41XU	Identification of Critical Residues in $G\alpha_{13}$ for Stimulation of p115RhoGEF Activity and the Structure of the $G\alpha_{13}$ -p115RhoGEF Regulator of G Protein Signaling Homology (RH) Domain Complex
25279	Daisuke Morishita	286 (2011) 2681-2688	理研	BL26B1	Cell-permeable Carboxy-terminal p27 _{Kip1} Peptide Exhibits Anti-tumor Activity by Inhibiting Pim-1 Kinase
			理研	BL26B2	
25465	Kazutaka Murayama	284 (2009) 35896-35905	理研	BL44B2	Crystal Structure of Epstein-Barr Virus DNA Polymerase Processivity Factor BMRF1
25523	Takashi Umehara	285 (2010) 7610-7618	理研	BL44B2	Structural Basis for Acetylated Histone H4 Recognition by the Human BRD2 Bromodomain

Journal of Molecular Biology

25163	Takashi Wada	411 (2011) 986-998	装置技術	BL41XU	Crystal Structure of the Eukaryotic Light-Driven Proton-Pumping Rhodopsin, <i>Acetabularia</i> Rhodopsin II, from Marine Alga
25175	Keiko Tsuganezawa	417 (2012) 240-252	理研	BL26B2	A Novel Pim-1 Kinase Inhibitor Targeting Residues That Bind the Substrate Peptide
25184	Kazutaka Murayama	423 (2012) 386-396	理研	BL32XU	Crystal Structure of Cucumisin, a Subtilisin-Like Endoprotease from <i>Cucumis melo</i> L.
25356	Muhamad Sahlan	399 (2010) 628-636	理研	BL26B1	Thermodynamic Characterization of the Interaction between Prefoldin and Group II Chaperonin

Journal of Structural and Functional Genomics-1

25290	Go Ueno	7 (2006) 15-22	理研	BL26B1	RIKEN Structural Genomics Beamlines at the SPring-8; High Throughput Protein Crystallography with Automated Beamline Operation
			理研	BL26B2	

Journal of Structural and Functional Genomics-2

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	チームライン	タイトル
25394	Takanori Kigawa	2 (2002) 29-35	理研	BL44B2	Selenomethionine Incorporation into a Protein by Cell-Free Synthesis
25458	Akio Ebihara	6 (2005) 21-32	理研	BL45XU	Structure-based Functional Identification of a Novel Heme-binding Protein from <i>Thermus thermophilus</i> HB8
25561	Alexander K. Goroncy	11 (2010) 247-256	理研	BL26B2	NMR and X-ray Structures of the Putative Sterol Carrier Protein 2 from <i>Thermus thermophilus</i> HB8 Show Conformational Changes

Journal of the American Chemical Society

25320	Kenzo Fujimoto	122 (2000) 5646-5647	その他		Template-Directed Photoreversible Ligation of Deoxyoligonucleotides via 5-Vinyldeoxyuridine
25580	Wataru Kosaka	135 (2013) 18469-18480	理研	BL44B2	Selective NO Trapping in the Pores of Chain-Type Complex Assemblies Based on Electronically Activated Paddlewheel-Type $[Ru_2^{II,II}]/[Rh_2^{II,II}]$ Dimers
25598	Qi Xiao	135 (2013) 18268-18271	理研	BL44B2	Propeller-Shaped Fused Oligothiophenes: A Remarkable Effect of the Topology of Sulfur Atoms on Columnar Stacking

Protein Science

25131	Akihiko Arakawa	20 (2011) 1367-1379	理研	BL26B2	Biochemical and Structural Studies on the High Affinity of Hsp70 for ADP
25173	Seisuke Kusano	21 (2012) 199-210	理研	BL26B2	Structural Basis for Extracellular Interactions between Calcitonin Receptor-like Receptor and Receptor Activity-modifying Protein 2 for Adrenomedullin-specific Binding
25182	Seisuke Kusano	21 (2012) 850-864	装置技術	BL41XU	Structural Basis of Interleukin-5 Dimer Recognition by its α Receptor

Structure

25169	Ella C. Morishita	19 (2011) 1496-1508	理研	BL26B2	Crystal Structures of the Armadillo Repeat Domain of Adenomatous Polyposis Coli and Its Complex with the Tyrosine-Rich Domain of Sam68
25191	Miki Hara-Yokoyama	20 (2012) 1585-1595	理研	BL26B2	Tetrameric Interaction of the Ectoenzyme CD38 on the Cell Surface Enables Its Catalytic and Raft-Association Activities
25558	Akihiko Arakawa	18 (2010) 309-319	理研	BL26B2	The C-Terminal BAG Domain of BAG5 Induces Conformational Changes of the Hsp70 Nucleotide-Binding Domain for ADP-ATP Exchange

Biochemical and Biophysical Research Communications

25224	Shinji Mori	435 (2013) 334-338	理研	BL26B2	Crystal Structure of the Guanylate Kinase Domain from Discs Large Homolog 1 (DLG1/SAP97)
25571	Aribam Swarmistha Devi	432 (2013) 350-354	理研	BL26B2	Crystal Structure of Type I 3-dehydroquinate dehydratase of <i>Aquifex aeolicus</i> Suggests Closing of Active Site Flap is not Essential for Enzyme Action

Biochemistry

25281	Shin Sato	50 (2011) 250-257	理研	BL26B2	Crystallographic Study of a Site-Specifically Cross-Linked Protein Complex with a Genetically Incorporated Photoreactive Amino Acid
			装置技術	BL41XU	
25286	Shinya Mimasu	49 (2010) 6494-6503	理研	BL26B2	Structurally Designed <i>trans</i> -2-Phenylcyclopropylamine Derivatives Potently Inhibit Histone Demethylase LSD1/KDM1
			装置技術	BL41XU	

FEBS Letters

25370	Akinori Okumura	587 (2013) 404-409	理研	BL26B1	Leukocyte Cell-Derived Chemotaxin 2 is a Zinc-Binding Protein
			理研	BL26B2	
25559	Atsushi Shimada	584 (2010) 1111-1118	理研	BL26B2	Mapping of the Basic Amino-Acid Residues Responsible for Tubulation and Cellular Protrusion by the EFC/F-BAR Domain of Pacsin2/Syndapin II
			装置技術	BL41XU	

Journal of Bacteriology

25355	Yuichi Sato	192 (2010) 1749	理研	BL26B1	Erratum: Crystal Structures of the Lumazine Protein from <i>Photobacterium kishitanii</i> in Complexes with the Authentic Chromophore, 6,7-Dimethyl-8-(1'-D-Ribityl) Lumazine, and Its Analogues, Riboflavin and Flavin Mononucleotide, at High Resolution
			理研	BL26B2	
25369	Yuichi Sato	192 (2010) 127-133	理研	BL26B1	Crystal Structures of the Lumazine Protein from <i>Photobacterium kishitanii</i> in Complexes with the Authentic Chromophore, 6,7-Dimethyl-8-(1'-D-Ribityl) Lumazine, and Its Analogues, Riboflavin and Flavin Mononucleotide, at High Resolution
			理研	BL26B2	

The Journal of Biochemistry

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	タイトル
25372	Tomotaka Moriguchi	148 (2010) 491-505	理研	BL26B1	Channeling and Conformational Changes in the Heterotetrameric Sarcosine Oxidase from <i>Corynebacterium</i> sp. U-96
			理研	BL44B2	
25459	Yoko Tanaka	138 (2005) 263-275	理研	BL45XU	Novel Reaction Mechanism of GTP Cyclohydrolase I. High-Resolution X-Ray Crystallography of <i>Thermus thermophilus</i> HB8 Enzyme Complexed with a Transition State Analogue, the 8-Oxoguanine Derivative

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America

25174	Kyoko Hanawa-Suetsugu	109 (2012) 3305-3310	装置技術	BL41XU	Structural Basis for Mutual Relief of the Rac Guanine Nucleotide Exchange Factor DOCK2 and Its Partner ELMO1 from Their Autoinhibited Forms
25358	Makoto Kawatani	105 (2008) 11691-11696	理研	BL26B2	The Identification of an Osteoclastogenesis Inhibitor through the Inhibition of Glyoxalase I

Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics

14125	Kazuki Kurimoto	75 (2009) 360-372	装置技術	BL41XU	AU-rich RNA-binding Induces Changes in the Quaternary Structure of AUH
25214	Hirofumi Nakagawa	81 (2013) 1232-1244	理研	BL32XU	Crystallographic and Mutational Studies on the tRNA Thiouridine Synthetase TtuA

Biochimica et Biophysica Acta

25357	Akashi Ohtaki	1804 (2010) 184-192	理研	BL26B2	Structure and Characterization of Amidase from <i>Rhodococcus</i> sp. N-771: Insight into the Molecular Mechanism of Substrate Recognition
-------	---------------	------------------------	----	--------	--

BMC Structural Biology

25616	Balasundaram Padmanabhan	13 (2013) 10	理研	BL26B1	Crystal Structure of Putative CbiT from <i>Methanocaldococcus jannaschii</i> : an Intermediate Enzyme Activity in Cobalamin (Vitamin B ₁₂) Biosynthesis
-------	--------------------------	--------------	----	--------	---

Cell

25352	Akiko Kumagai	153 (2013) 1602-1611	理研	BL26B2	A Bilirubin-Inducible Fluorescent Protein from Eel Muscle
-------	---------------	-------------------------	----	--------	---

Crystal Growth & Design

25354	Hideyuki Miyatake	12 (2012) 4466-4472	理研	BL26B2	Real-Time Control of Nanoscale Protein Assembly for Further Crystallization Using a Solution Circulating Nanoaggregation Control Apparatus
-------	-------------------	------------------------	----	--------	--

Experimental Cell Research

25321	Akihiko Nishikimi	319 (2013) 2343-2349	装置技術	BL41XU	Immune Regulatory Functions of DOCK Family Proteins in Health and Disease
-------	-------------------	-------------------------	------	--------	---

Journal of Biophysics

25569	Jeyaraman Jeyakanthan	2009 (2009) 434038	理研	BL26B1	Crystal Structural and Functional Analysis of the Putative Dipeptidase from <i>Pyrococcus horikoshii</i> OT3
			理研	BL26B2	

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena

25596	Anders Nilsson	188 (2013) 84-100	理研	BL17SU	Resonant Inelastic X-ray Scattering of Liquid Water
-------	----------------	----------------------	----	--------	---

Journal of Medicinal Chemistry

25211	Hirofumi Nakano	55 (2012) 5151-5164	理研	BL26B2	Rational Evolution of a Novel Type of Potent and Selective Proviral Integration Site in Moloney Murine Leukemia Virus Kinase 1 (PIM1) Inhibitor from a Screening-Hit Compound
-------	-----------------	------------------------	----	--------	---

Journal of Physics: Conference Series

22869	Satoshi Matsuyama	463 (2013) 012017	理研	BL29XU	Development of Achromatic Full-Field Hard X-ray Microscopy Using Four Total-Reflection Mirrors
-------	-------------------	----------------------	----	--------	--

Journal of Structural Biology

研究成果番号	主著者	雑誌情報	課題番号	ビームライン	タイトル
25462	Ryoichi Arai	168 (2009) 575-581	理研	BL26B1	Crystal Structure of MqnD (TTHA1568), A Menaquinone Biosynthetic Enzyme from <i>Thermus thermophilus</i> HB8
			理研	BL26B2	

Journal of Virology

25371	Anita R. Chacko	85 (2011) 12721-12732	理研	BL26B2	Novel Pentameric Structure of the Diarrhea-Inducing Region of the Rotavirus Enterotoxigenic Protein NSP4
-------	-----------------	--------------------------	----	--------	--

Metallomics

25325	Satoshi Matsuyama	5 (2013) 492-500	理研	BL29XU	Scanning Protein Analysis of Electrophoresis Gels Using X-ray Fluorescence
-------	-------------------	---------------------	----	--------	--

Molecular Cell

25360	Tadashi Satoh	40 (2010) 905-916	理研	BL26B2	Structural Basis for Oligosaccharide Recognition of Misfolded Glycoprotein by OS-9 in ER-Associated Degradation
-------	---------------	----------------------	----	--------	---

Nano Letters

24999	Eda Yilmaz	13 (2013) 4679-4684	理研	BL44B2	Promoting Formation of Noncrystalline Li ₂ O ₂ in the Li-O ₂ Battery with RuO ₂ Nanoparticles
-------	------------	------------------------	----	--------	---

Nature Chemical Biology

25359	Isao Miyazaki	6 (2010) 667-673	理研	BL26B2	A Small-Molecule Inhibitor Shows that Pirin Regulates Migration of Melanoma Cells
-------	---------------	---------------------	----	--------	---

Nucleic Acids Research

25524	Fumie Iraha	38 (2010) 3682-3691	理研	BL26B1	Functional Replacement of the Endogenous Tyrosyl-tRNA Synthetase-tRNA ^{Tyr} Pair by the Archaeal Tyrosine Pair in <i>Escherichia coli</i> for Genetic Code Expansion
-------	-------------	------------------------	----	--------	---

Oncogene

25176	Seiko Yoshikawa	32 (2013) 27-38	理研	BL26B2	Structural Basis for the Altered Drug Sensitivities of Non-Small Cell Lung Cancer-Associated Mutants of Human Epidermal Growth Factor Receptor
			装置技術	BL41XU	

Optics Express

25328	Takashi Kimura	21 (2013) 9267-9276	理研	BL29XU	Coherent X-ray Zoom Condenser Lens for Diffractive and Scanning Microscopy
-------	----------------	------------------------	----	--------	--

Organic & Biomolecular Chemistry

25193	Tomomi Sumida	10 (2012) 2607-2612	理研	BL26B2	Gaining Insight into the Inhibition of Glycoside Hydrolase Family 20 <i>exo</i> - β -N-acetylhexosaminidases using a Structural Approach
-------	---------------	------------------------	----	--------	--

Physical Review B

24985	Y. W. Long	86 (2012) 064436	理研	BL17SU	Evaluation of Magnetic Phases in Single Crystals of SrFe _{1-x} Co _x O ₃ Solid Solution
-------	------------	---------------------	----	--------	---

Physical Review Letters

23880	Yoshikazu Tanaka	108 (2012) 019901(E)	理研	BL17SU	Erratum: Right Handed or Left Handed? Forbidden X-Ray Diffraction Reveals Chirality [Phys. Rev. Lett. 100, 145502 (2008)]
-------	------------------	-------------------------	----	--------	---

Physics Letters B

23480	Toshiaki Inada	722 (2013) 301-304	理研	BL19LXU	Results of a Search for Paraphotons with Intense X-ray Beams at SPring-8
-------	----------------	-----------------------	----	---------	--

Proceedings of SPIE

25327	Satoshi Matsuyama	8851 (2013) 885107	理研	BL29XU	Development of Achromatic Full-Field X-ray Microscopy with Compact Imaging Mirror System
-------	-------------------	-----------------------	----	--------	--

Science Translational Medicine

25222	Yoriko Saito	5 (2013) 181ra52	装置技術	BL41XU	A Pyrrolo-Pyrimidine Derivative Targets Human Primary AML Stem Cells in Vivo
			理研	BL32XU	

SPring-8 利用研究成果の論文分析 2013

一年間論文数と論文被引用状況

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用業務部 図書情報課

1. はじめに

SPring-8利用成果の自己評価として、論文の量だけでなく、質の視点から評価分析するために、2013年5月に論文被引用数の調査を行った。論文被引用数は、研究評価のメトリックスとして広く利用されている。本集計にあたっては個々の論文からビームライン別の平均論文被引用数を集計し、施設有効利用の指標のひとつとして活用することを目的としている。

2. 集計方法

2-1. 集計対象論文について

論文被引用数を求める母数として、以下の要件を設定した。

i) SPring-8論文発表等登録データベースに登録されている原著論文であること

SPring-8の成果と見なす論文は、各ユーザから「論文発表等登録データベース」に原著論文として登録された論文のみを集計母体とした。「SPring-8/SACLA 利用研究成果集」において発表された論文は含まない。

ii) SPring-8ビームラインを利用した成果であること

「論文発表等登録データベース」に登録される原著論文のうち、SPring-8のいずれかのビームラインに関連した原著論文を被引用数集計対象とする。当該データベースには、加速器等に代表されるビームラインに依存しない研究成果もSPring-8の成果として登録されているが、ビームラインに依存するユーザの利用成果状況把握を集計主旨とするため、対象からは除外する。

iii) 成果妥当性が確認できること

「論文発表等登録データベース」は、ユーザからの自己申告登録により、関連課題、関連

ビームライン等の登録を受けている。図書情報課では、登録された論文の内容を確認し、必要であれば、著者への問合せを実施して、SPring-8としての成果であることを確認している。

2-2. 集計方法について

集計対象論文に対する論文被引用数集計方法を以下に示す。

i) 被引用数取得方法

論文被引用数の集計には、今回は学術文献・引用索引DBとして認知されている Elsevier 社 Scopus を利用した。

ii) 分類方法

用途により、以下の分類を用いる。

・ビームライン種別集計

各ビームラインを共用、専用、理研の種別に分類し、各種別の論文数、論文被引用数の集計を行う。また、合計値が総計を示すよう、一つの論文は代表されるいずれか一つのビームライン種別に含まれるよう分類するため、ビームライン種別集計値は参考値を提供している。また、利用する学術文献・引用索引DBから論文被引用数が取得出来ない論文が存在した場合、本集計では集計対象の母数から除外して、平均論文被引用数を求めることとする。

・ビームライン別集計

各ビームライン別に関連する論文を集計する。集計には、整数カウント法を採用し、一つの論文が関連する全てのビームラインに加算を行う。

3. 集計結果について

各集計結果について、以下に示す。

表1にSPring-8を利用した発表論文の総数と累積被引用数を示す。

1) 1997-2013 (供用開始からの総数)

i) 累積論文数 --- SPring-8 が供用を開始した1997年から、調査を行った2013年5月までに登録を受けた総論文数は、8043件である。そのうち、以下の論文について、母数から除外した。

- ・論文被引用数が不明な論文 --- 464件
- ・加速器診断用ビームラインに関わる論文 --- 48件

ii) 累積被引用数 --- 調査を行った時点での各論文の被引用数の合計を示す。

iii) 平均被引用数 --- 累積被引用数を年別論文数で除した値を示す。

2) 2002-2012 (最近11年間の総数)

一般的に論文被引用数は、論文が発表されてから他の論文に引用され始めるまでに時間がかかり、そ

の後数年の間被引用数は増加し続け、徐々に増加値は収束していく。Thomson Reuters 社が毎年公開する論文の引用動向調査においては、論文発表から11年間を集計期間の対象としている。本調査でも、上記との比較を視野に入れ、2002年から2012年の11年間に発表された論文を対象に集計を行った。

3) 2011 (2011年の年間総数)

論文発表から有効被引用数を示すまでの経過値として2年を目安にし、論文発表から2年経過した時点の被引用数を集計した。

4) ビームライン種別 (共用、専用、理研)

各ビームラインを表1注釈に示すとおり分類した。また、合計値が総計を示すよう、一つの論文は代表されるいずれか一つのビームライン種別に含まれるよう分類した。よって、ビームライン種別集計は便宜的分類であり、参考値として集計した。

調査期間:2013/05/01-2013/05/02

	1997-2013 (供用開始からの総数)			2002-2012 (最近11年間の総数)			2011 (2011年の年間総数)		
	累積 論文数	累積 被引用数	平均 被引用数	累積 論文数	累積 被引用数	平均 被引用数	年間 総論文数	累積 被引用数	平均 被引用数
SPring-8(ALL)	7531	119515	15.9	6817	98122	14.4	754	3703	4.9
共用 BL	5375	83235	15.5	4870	70388	14.5	567	2910	5.1
専用 BL	1317	18513	14.1	1208	16040	13.3	139	580	4.2
理研 BL	839	17767	21.2	739	11694	15.9	48	213	4.4

●集計対象 BL

共用 BL --- 計26本

BL01B1 BL02B1 BL02B2 BL04B1 BL04B2 BL08W BL09XU BL10XU BL13XU BL14B2 BL19B2
BL20B2 BL20XU BL25SU BL27SU BL28B2 BL35XU BL37XU BL38B1 BL39XU BL40B2 BL40XU
BL41XU BL43IR BL46XU BL47XU

専用 BL --- 計17本

BL03XU BL07LSU BL08B2 BL11XU BL12B2 BL12XU BL14B1 BL15XU BL16B2 BL16XU BL22XU
BL23SU BL24XU BL32B2 BL33LEP BL33XU BL44XU

理研 BL --- 計8本

BL17SU BL19LXU BL26B1 BL26B2 BL29XU BL32XU BL44B2 BL45XU

●備考

*1: 2013年は、2013年1月1日から2013年4月30日までに発行された論文を集計対象とした。それ以外は、各年1月1日から12月31日までに発行された論文を集計対象とした。

*2: 以下のBLは調査対象から除外した。

加速器診断用 BL --- BL05SS BL38B2

調査時における供用開始から2年以内のBL --- BL43XU (供用開始2011年10月)、BL28XU (同2012年4月)、BL36XU (同2013年1月)、BL31LEP (同2013年5月)

*3: BL32B2 (創薬産業BL)は、専用BLに含めた(2012/3/29に設置期間終了)。

表1 SPring-8を利用した発表論文の総数と累積被引用数

表2および図1に年別発行論文数と2013年5月1～2日における平均被引用数(2002-2012)を示す。

- 1) 2002-2012 --- 各年1月1日から12月31日までに発行された論文を集計する。
- 2) 年別論文数 --- 当該年に発表されたSpring-8の成果と登録論文数。ただし、以下の論文について、母数から除外した。
 - ・論文被引用数が不明な論文
 - ・加速器診断用ビームラインに関わる論文
- 3) 累積被引用数 --- 調査を行った時点での各論文の被引用数の合計
- 4) 平均被引用数 --- 累積被引用数を年別論文数で除した平均値

図2にBL別累積論文数と累積被引用数の比較(1997-2013年の発表論文)を示す。

本集計では、整数カウント法を採用し、一つの論文が関連する全てのビームラインに加算を行った。又、累積論文数には被引用数が確認できない論文も

計上し、真値に近づけた。

図3にBL別累積論文数と累積被引用数の比較(2002-2012年の発表論文)を示す。図2同様の集計を2002年から2012年の11年間に注目して集計した。

図4にBL別累積論文数と累積被引用数の比較(2011)を示す。図2同様の集計を論文発表後2年経過値(2011年発行論文)に注目して集計した。

表3に2011年発行論文における被引用数ベスト10の論文リストを示す。2011年に発行された論文に関する被引用数上位10位を掲載している。

4. おわりに

Spring-8利用者情報では毎号「論文発表の現状」において、Spring-8を利用した成果として各ビームライン別に集計した論文成果状況を掲載しているが、今年より年一回、各論文が他の論文から何回引用されているかを示す、論文被引用数(サイテーション数)の集計結果も掲載することにする。今後、同様の集計方法をもって毎年5月第1週に集計作業を行い、本誌各8月号に掲載の予定である。

調査期間: 2013/05/01-2013/05/02

Spring-8	2012	2011	2010	2009	2008	2007	2006	2005	2004	2003	2002
年別論文数	582	754	697	719	715	748	616	653	571	418	344
累積被引用数	986	3703	5016	8871	9322	10148	11264	11395	14802	11379	11236
平均被引用数	1.7	4.9	7.2	12.3	13.0	13.6	18.3	17.5	25.9	27.2	32.7

表2 年別発行論文数と2013年5月1-2日における平均被引用数(2002-2012)

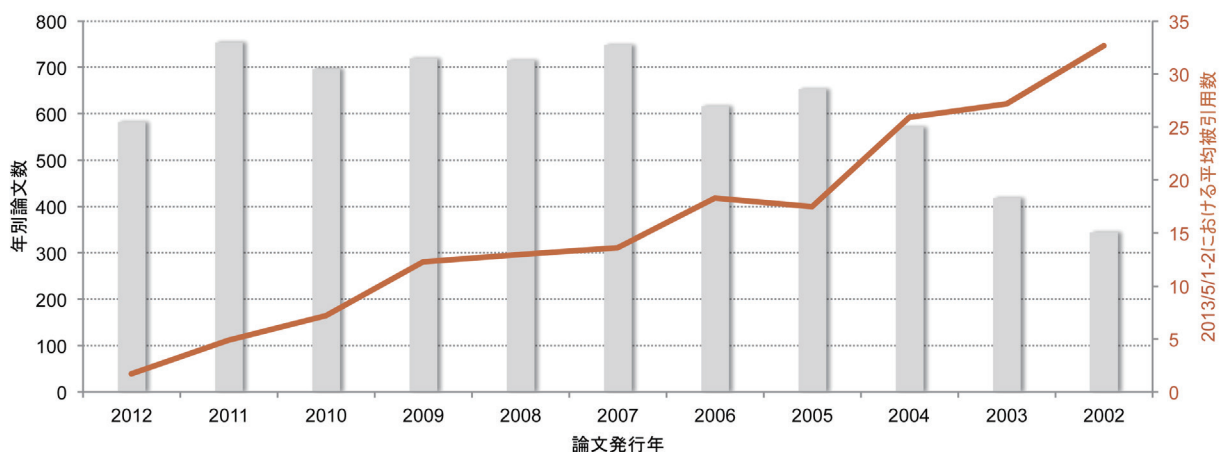
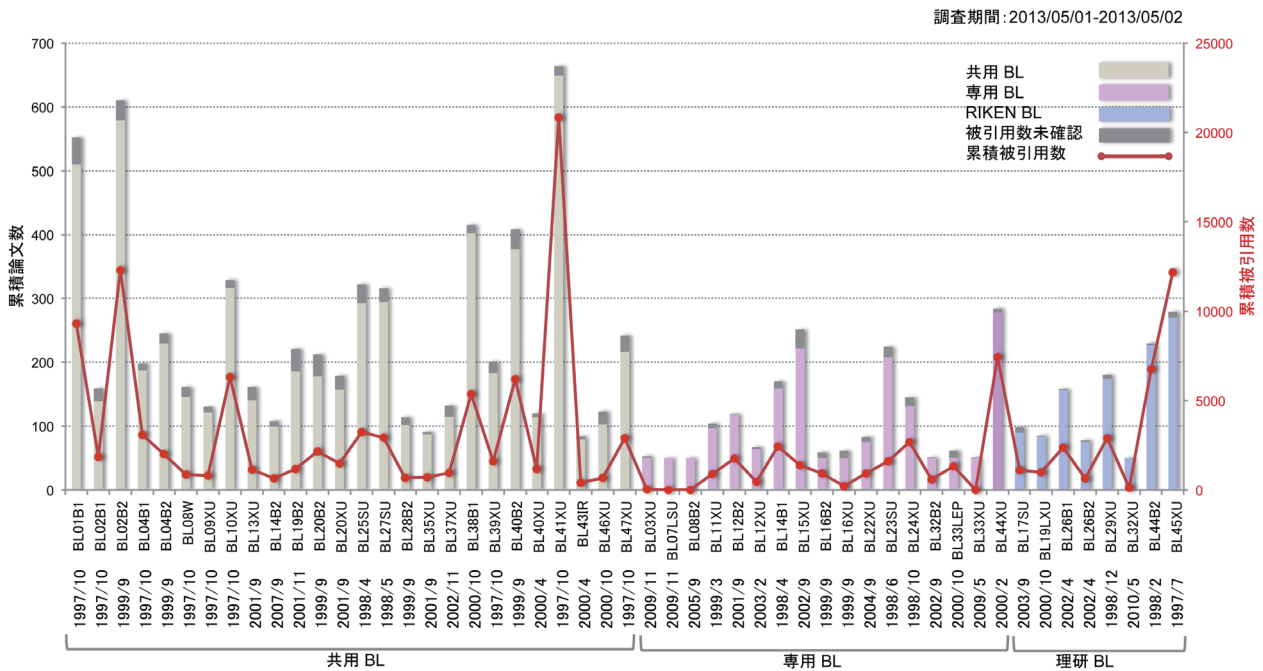
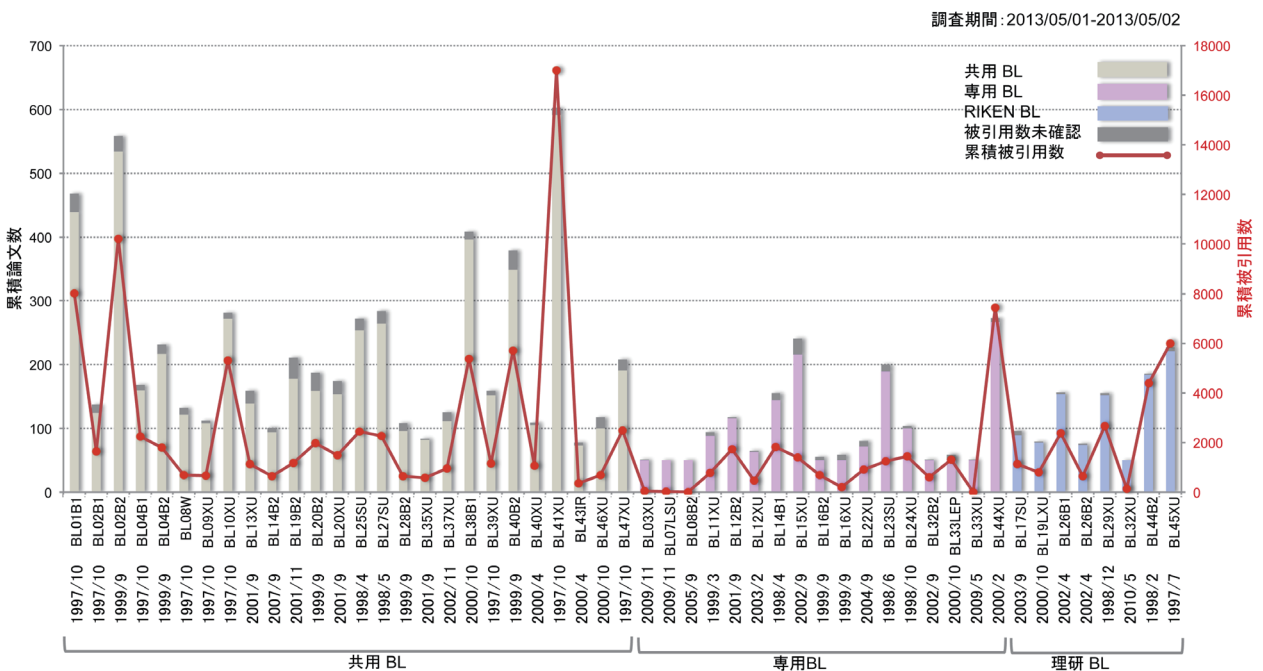


図1 年別発行論文数と2013年5月1-2日における平均被引用数(2002-2012)



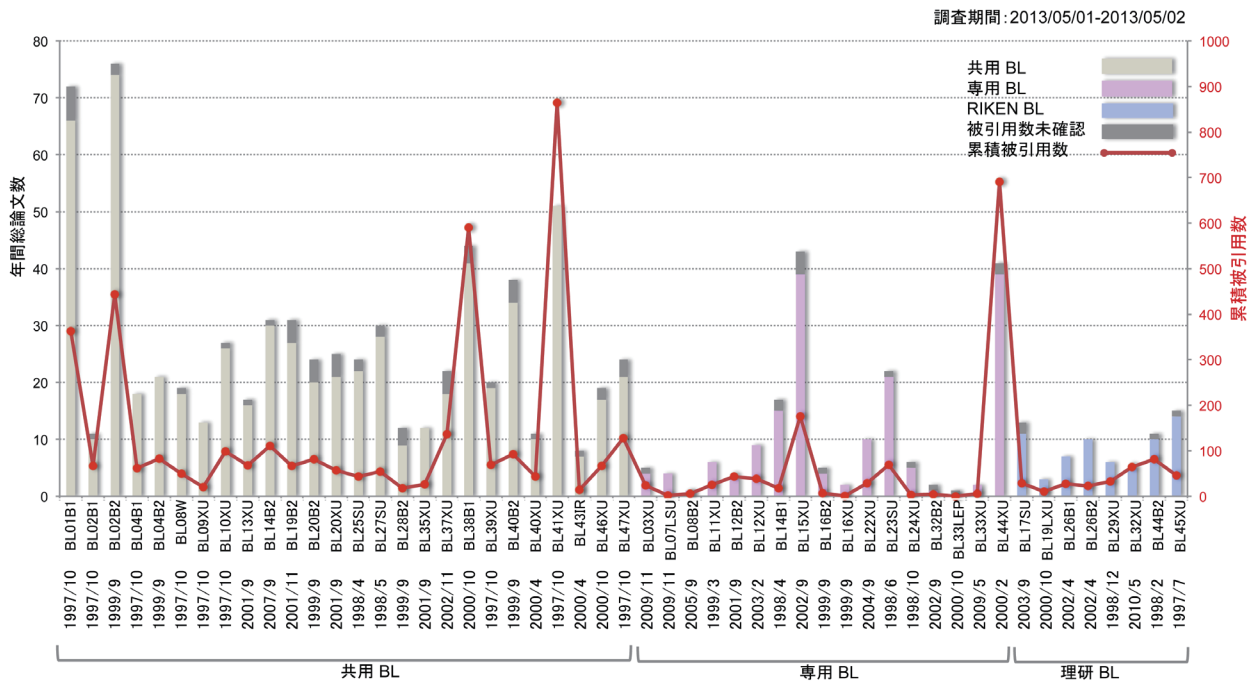
*1) 検索 DB (Elsevier Scopus) 未登録のため、被引用数が確認できない論文は「被引用数未確認」に計上する。
*2) 一つの論文が異なる複数の BL に関わる共通の成果とみなせる場合、各 BL それぞれに計上する。

図2 BL 別累積論文数と累積被引用数の比較 (1997-2013年の発表論文)



*1) 検索 DB (Elsevier Scopus) 未登録のため、被引用数が確認できない論文は「被引用数未確認」に計上する。
*2) 一つの論文が異なる複数の BL に関わる共通の成果とみなせる場合、各 BL それぞれに計上する。

図3 BL 別累積論文数と累積被引用数の比較 (2002-2012年の発表論文)



*1) 検索 DB (Elsevier Scopus) 未登録のため、被引用数が確認できない論文は「被引用数未確認」に計上する。
 *2) 一つの論文が異なる複数の BL に関わる共通の成果とみなせる場合、各 BL それぞれに計上する。

図4 BL 別年間総論文数と総被引用数の比較 (2011年の発表論文)

#	回数	BL	実験責任者	タイトル	筆頭著者	所属	投稿先ジャーナル名
1	382	BL38B1 BL41XU BL44XU	Jian-Ren Shen	Crystal Structure of Oxygen-Evolving Photosystem II at a Resolution of 1.9 Å	Yasufumi Umena	Osaka City University	Nature Vol.473 No.7345 p55-60
2	75	BL02B2	Shinichi Komaba	Detailed Studies of a High-Capacity Electrode Material for Rechargeable Batteries, Li ₂ MnO ₃ -LiCo _{1/3} Ni _{1/3} Mn _{1/3} O ₂	Naoaki Yabuuchi	Tokyo University of Science	Journal of the American Chemical Society Vol.133 No.12 p4404-4419
3	71	BL37XU	Horacio Cabral	Accumulation of Sub-100 nm Polymeric Micelles in Poorly Permeable Tumours Depends on Size	Horacio Cabral	The University of Tokyo	Nature Nanotechnology Vol.6 No.12 p815-823
4	41	BL32XU	Toyoyuki Ose	Structure of the Measles Virus Hemagglutinin Bound to its Cellular Receptor SLAM	Takao Hashiguchi	Kyushu University	Nature Structural and Molecular Biology Vol.18 No.2 p135-141
4	41	BL41XU	Hitoshi Kurumizaka	Crystal Structure of the Human Centromeric Nucleosome Containing CENP-A	Hiroaki Tachiwana	Waseda University	Nature Vol.476 No.7359 p232-235
6	40	BL41XU	Masaki Yamamoto	Crystal Structure of Autotaxin and Insight into GPCR Activation by Lipid Mediators	Hiroshi Nishimasu	The University of Tokyo	Nature Structural and Molecular Biology Vol.18 No.2 p205-212
7	35	BL12B2	Nei Li Chan	Structural Basis of Type II Topoisomerase Inhibition by the Anticancer Drug Etoposide	Chyuan-Chuan Wu	National Taiwan University	Science Vol.333 No.6041 p459-462
8	33	BL01B1	Shun Nishimura	Hydrothermalite-Supported Gold-Nanoparticle-Catalyzed Highly Efficient Base-Free Aqueous Oxidation of 5-hydroxymethylfurfural into 2,5-furandicarboxylic Acid under Atmospheric Oxygen Pressure	Navneet Kumar Gupta	Japan Advanced Institute of Science and Technology	Green Chemistry Vol.13 No.4 p824-827
9	32	BL41XU BL44XU	Masaki Yamamoto	14-3-3 Proteins Act as Intracellular Receptors for Rice Hd3a Florigen	Ken-Ichiro Taoka	Nara Institute of Science and Technology	Nature Vol.476 No.7360 p332-335
10	31	BL41XU BL44XU	Yasuhiro Shomura	Structural Basis for a Cluster in the Oxygen-Tolerant Membrane-Bound hydrogenase	Yasuhiro Shomura	University of Hyogo, SPring-8/RIKEN	Nature Vol.479 No. 7372 p253-256

表3 2011年発行論文における被引用数ベスト10の論文リスト

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 活動報告

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 庶務幹事
独立行政法人理化学研究所 放射光科学総合研究センター
西堀 英治

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) が発足して1年半が経過し、ユーザーの各研究会活動に加えて、1) 代表機関を会場とした SPring-8 シンポジウムの開催、2) 代表機関会議の開催、3) 企画委員会の設置と、その中への時限付ワーキンググループ (作業部会) の設置、など様々な活動が進められています。ここでは最近の SPRUC の活動について報告いたします。

企画委員会作業部会の設置と活動状況

「放射光科学将来ビジョン」

「放射光科学将来ビジョン WG」は、日本の放射光科学のグランドデザインの議論と意見集約を行い、それを踏まえて SPring-8 の将来計画を検討することを目的に設置されました。2013年9月の SPring-8 シンポジウム2013での活動報告、9月20日～10月18日の日程での「SPRUC 放射光科学将来ビジョン白書骨子」に対するパブリックコメントの募集 (http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/pub_comment_2013-2.html) など、2014年3月の「放射光科学将来ビジョン白書」の策定に向けた活動が進められています。

「研究会組織検討」

「研究会組織検討 WG」は、SPRUC の研究会活動を SPring-8 の外部へも積極的にアピールするとともに、研究成果やビームラインに関する情報交換をこれまで以上に円滑に行い、多様化するユーザーからの意見を集約できる組織を構築するために設置されました。8月の中間報告書の作成・公開およびパブリックコメント募集 (http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/pub_comment_2013.html)、SPring-8 シンポジウム2013でのパネルディスカッション、11月の研究会代表者による拡大利用委員会で新組織に対する議論を重ね、12月に第2期研究会組織最終提案書を作成しました。この案につきましては、12月6日～12月24日の日程でパブリックコメント募

集 (http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/pub_comment_2013-3.html) を行いました。皆様からいただいた意見をもとに検討を行い、2014年1月の評議員会で2014年度から開始される次期研究会組織を決定する予定です。また、2014年2月1日、2日に、既存研究会員に次期研究会組織の周知と今後の SPring-8 利用に対する議論を目的とした“SPRUC 拡大研究会・SPring-8 利用ワークショップ—SPring-8 とユーザーのさらなる連携を目指して—”が SPring-8 にて行われます。

「大学院連合検討」

「大学院連合検討 WG」は、次世代の放射光科学を含めた幅広い科学技術の発展を担う人材育成を行うために、SPRUC が主体となり、大学院生や企業の若手研究者に提供する講義や実習に関する議論と意見集約を目的として、2013年12月1日付で設置されました。大阪大学高尾正敏教授を責任者として、「SPring-8 夏の学校」や「博士課程リーディングプログラム」など様々な教育イベント・プログラムに配慮しつつ大学院生や企業の若手研究者に対する教育プログラムについて議論を進める予定です。

第3回 SPring-8 ユーザー協同体 評議員選挙

SPRUC 会則に則り、平成26年3月末で任期を迎える評議員の改選選挙を12月4日～12月25日の日程で行い、15名の評議員が選出されました。評議員は2年任期、1年毎の半数改選となっております。
(http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/elected_person_3rd.html)

西堀 英治 NISHIBORI Eiji

(独)理化学研究所 放射光科学総合研究センター
〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1
TEL: 0791-58-0803 ext 7986
e-mail: eiji.nishibori@riken.jp

「専用ビームライン 中間評価」について

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用業務部

SPring-8 の専用ビームライン（以下専用 BL と記します）は、（独）理化学研究所以外の設置者が、その利用目的に添った計画を立案し、登録施設利用促進機関である JASRI に設置した専用施設審査委員会および SPring-8 選定委員会において「放射光専用施設の設置計画の選定に関する基本的考え方」に基づき検討評価され、選定されます。

現在、SPring-8 には国内外・産学官の設置者による 19 本の専用 BL が稼働中です。設置が認められた専用 BL は、その設置期間の中間期を目処に専用施設審査委員会等において、その使用状況および研究成果等の中間評価が行われ、継続、改善、中止等の判定が行われます。

平成 26 年 2 月に開催しました SPring-8 選定委員会において、平成 25 年 8 月および 9 月の専用施設審査委員会で中間評価を実施した下記 5 本の専用 BL の評価結果が審議され、ともに引き続きビームラインの運用を「継続」する旨の結果を得ましたので、財団より、各設置者へ通知いたしました。

記

中間評価実施専用 BL

1. サンビーム ID ビームライン (BL16XU)
2. サンビーム BM ビームライン (BL16B2)
(設置者：産業用専用ビームライン建設利用共同体)
3. 豊田ビームライン (BL33XU)
(設置者：株式会社 豊田中央研究所)
4. 生体超分子複合体構造解析ビームライン (BL44XU)
(設置者：国立大学法人 大阪大学蛋白質研究所)
5. 東京大学放射光アウトステーション物質科学ビームライン (BL07LSU)
(設置者：国立大学法人 東京大学)

※各専用 BL の評価結果は次頁以降に掲載

「サンビーム ID/BM (BL16XU/BL16B2) 専用施設 中間評価結果」

サンビームは、挿入光源のビームライン BL16XU と偏向電磁石光源のビームライン BL16B2 より成り、産業用専用ビームライン建設利用共同体（以下共同体）が 1998 年から建設、1999 年より運用を行なっている。現在の第二期設置契約期間（2008 年 8 月～2018 年 8 月）を開始するにあたり 2007 年に承認された計画に基づいた機器整備が着実に実施され利用されていること。『サンビーム年報・成果集』の発行等による利用成果発信への努力が認められること。硬 X 線光電子分光装置の新規導入等の今後の機器整備も適切な計画と評価できること等を鑑み、専用施設審査委員会（以下本委員会）は第二期後半も当該ビームラインの設置と運用を「継続」することを勧告することが妥当であると判断した。

なお、共同体の活動は放射光関係者への認知は進んでいる一方、一般社会における認知は必ずしも十分ではないと考えられることから、今後の利用成果についての情報発信の強化を期待する。

以下、共同体から本委員会に提出された「サンビーム ID/BM 中間評価報告書」と平成 25 年 8 月 30 日に開催された委員会での報告および討議に基づき、以下の点についてその評価と提言を記す。

1. 「装置の構成と性能」に対する評価

BL16XU、BL16B2 とともに各社の解析ニーズの高度化・多様化、利用技術の向上、並びに設備の老朽化や陳腐化を考慮して「世界最高の各種汎用測定」の実現を目指した機器整備が行なわれている。BL16XU の入射光形成機器については、二結晶分光器をピンポスト傾斜型直接水冷方式から液体窒素間接冷却型への更新と移相子光学系の利用可能なエネルギー範囲の拡大を計画通り実施している。強度分布の均一性の確保など更なるビームの質的向上を期待したい事項もあるが、実験ハッチに導入される X 線ビームの位置安定性の向上と 8 倍の強度増加を実現したことは高く評価できる。これにより BL16XU で実施する全ての実験、特にマイクロビームを用いた X 線回折、蛍光 X 線測定、XAFS 測定や XMCD 測定の性能が向上し、分光器の更新は成功だったと認められる。

BL16XU の実験装置の高度化は、ビームライン

に設置された蛍光 X 線分析装置、回折装置、マイクロビーム形成装置の全てについて計画どおり実施されている。蛍光 X 線分析装置では、波長分散方式とエネルギー分散方式の二方式での測定を踏襲しつつ試料ステージの自由度を向上させ、波長分散方式において、コンプトン散乱を抑制した良好なスペクトルが得られるようにしている。また、シリコンドリフト検出器 (SDD) への更新を通じてエネルギー分散方式での測定効率を向上させている。更に、第一期に設置されていた回折装置を廃して 8 軸回折計 (Huber 製) を導入することにより回折計の軸自由度と試料位置走査範囲の拡大、及び CdTe 検出器を導入して高エネルギー X 線の高感度・高エネルギー分解能 X 線回折を可能にした。マイクロビーム形成装置は、フレネルゾーンプレート (FZP) による集光機能を追加するとともに、垂直 (鉛直) 回転軸試料台と水平回転軸試料台の新設によりサブマイクロメータ集光ビームを用いた X 線回折、蛍光 X 線測定、XAFS 測定や XMCD 測定のマッピング測定が可能となった。加えて大面積 SDD (素子面積 80 mm²) を導入によりマイクロビームを利用した蛍光 X 線マッピング測定を高感度化している。また、BL16B2 が先行して導入していた反応性ガス供給・排気装置を新設し、ガス雰囲気下でのその場反応 (in-situ) X 線回折測定を実現している。

BL16B2 は実験ハッチへの 6 軸 X 線回折計、19 素子 SSD 検出器、XAFS 用ガス混合器、X 線フラットパネル検出器の新規導入と XAFS 用冷凍機の改造を計画通りに実施し、蛍光 quick-XAFS や二次元 XAFS、及び高エネルギー X 線回折が可能となった。光学系・測定系の改良に加えて、反応性ガス導入装置の汎用化など、産業利用上必須の実験環境の充実など、産業利用に特化したビームライン構成として整備されている。以上の機器整備は他のビームラインとの比較において新奇性が高くはないが、標準的なものであり、産業利用を対象としたビームラインの「世界最高の各種汎用測定」を目標に整備を着実に実施していることは評価に値する。懸念としては、ビーム強度改善、検出器の 2 次元化等計測系のパフォーマンスが向上すると、処理できないほどの計測データが集積することになりかねない。単に記録装置 (HDD) の容量不足だけでなく、データを処理して有用な結果解釈を得るプロセスに関わるパワーソースの不足も容易に予想される。これらいわゆるビッグデータについて効率的な取扱いなど検

討がなされることを期待する。

2. 「施設運用及び利用体制」に対する評価

業種の異なる 13 社が共同して運営する世界的にも稀な利用体制であるが、安全衛生、利用計画及び装置ごとにサブグループを設置する等の工夫で共同運営が円滑に行われていることは高く評価できる。人材育成も着実に進んでいると認められる。各社平等での利用・運営を原則としているが、新規技術の迅速な導入や成果創出の促進とは相容れない可能性もある上、建設当時の試行錯誤であった時期から相当進歩、発展しており、各社各業界で計測テーマや利用頻度にも差が出てきたと判断できることから、利用・運営方法を工夫し、最適なビームタイムの配分を検討することも必要と考えられる。

共同体外のアカデミア等との連携についても活動が進んでいることは評価できる。実際、参画各社はサンビーム以外の共用ビームラインを適宜使用しており、計測手法等で巧みに使い分けている。SPring-8 全体で考えた場合、専用施設といえども SPring-8 の他の先進的なビームライン装置との補完的な利用も必要であると判断できることから、さらなる共同研究など積極的な連携への取組を期待する。

3. 「研究課題、内容、成果」に対する評価

論文発表等は少ないものの、ある程度の特許出願やプレス発表が行われていることから利用成果が各社の技術開発活動に寄与していることをうかがい知ることができる。更に、サンビーム研究発表会を定期的に継続して実施している上、2011 年度からは JASRI の SPring-8 成果審査委員会により「公開技術報告書」として認定された当該年度の利用研究課題の成果を掲載した『サンビーム年報・成果集』を発行し利用成果の公開を促進する姿勢は高く評価することができる。一方、同成果集には、査読付き論文誌への発表に値する内容の報文が少なからず認められ、これらは、より広範な成果公開を行う観点から積極的に論文誌に投稿することが望ましい。また、放射光の産業利用が産業の国際競争力の強化や企業活動の活性化に大いに有用であることが広く社会一般に認知されることは、SPring-8 及び放射光科学の発展の為に極めて重要である。本委員会は、社会的影響力の大きな我が国の代表的な企業群より構成される共同体に、産業界における放射光利用成果

の社会還元や情報発信の方法を積極的に検討し、放射光利用成果をより明瞭に公表するための努力を求めたい。

4. 「今後の計画」に対する評価

試料高温加熱装置や、一次元、二次元検出器の導入、硬 X 線光電子分光装置の新規導入は、機器整備として標準的なものであり適切な整備計画と認められる。また、各社からのニーズ調査と合意形成の上でこれらの機器整備を意欲的に行うことは評価する。より迅速な新規技術導入を実現するために共同体内で最新の技術情報が共有できるような取り組みを期待する。なお、硬 X 線光電子分光装置の導入はタイムリーな計画であり評価するが、ビームラインに設置された機器が増えるためビームタイム配分等について工夫が必要と判断する。繰り返しになるが、本委員会は機器整備と並行して利用成果についての情報発信の強化を強く期待したい。

以上

「豊田ビームライン (BL33XU) の専用施設中間評価結果」

豊田ビームラインは SPring-8 初のテーパーアンジュレーターを光源とするビームラインであり、豊田中央研究所の専用ビームラインという特性に対応して、研究目的を精選し、共用ビームラインでは実施困難な特徴のある研究を遂行出来るビームラインとして建設、研究がなされている。また数十人に上る定常ユーザーをグループ社内に育成し、利用者数としては約 150 名に上っている点は SPring-8 における放射光利用研究がグループ社内に定着してきた現れとして評価出来る。専用施設審査委員会（以下本委員会）は、これらの実績を高く評価し、当該ビームラインの設置と運用を「継続」することを勧告することが妥当であると判断した。

以下、株式会社豊田中央研究所から本委員会に提出された「豊田ビームライン中間評価報告書」と平成 25 年 8 月 30 日に開催された委員会での報告および討議に基づき、以下の点についてその評価と提言を記す。

1. 「装置の構成と性能」に対する評価

長年に亘るサンビームをはじめとする国内外の放

射光施設を利用して研究を行ってきた経験を活かし、(1) 排ガス触媒や二次電池等の機能性材料のリアルタイム解析と(2) 金属やセラミックス材料の非破壊内部構造解析の二つを研究目的の中心に据え、それらの目的に適したビームライン、実験法の整備を着実に進めている。

(1) の研究目的達成のためには、SPring-8 で初めてテーパーアンジュレーターを光源として導入し、コンパクト結晶分光器や高速測定に対応出来る電離箱、信号処理系を開発・導入し、最短 10 ms 間隔での XAFS スペクトル測定を実現している。また、自動車用排ガス処理触媒をはじめとする反応をオペランド条件下で測定するために、独立した実験棟を建設し、設定した各種のパラメータに基づき雰囲気等を自動的に制御出来る高速ガス反応解析システムを独自に開発し、設置している。独立した実験棟を建設したことにより、高圧ガス規制法の要求を満たし、かつ安全を確保しながら、実験に各種のガスを使用することを容易にしている。

(2) の研究目的達成のためには、二次元検出器 Pilatus 300 K を備えた標準的な回折計を整備するほかに、多結晶材料中における結晶方位分布を非破壊で三次元的に観察する手法として走査型三次元 X 線回折顕微鏡 (S3DXRD) を開発し、実証実験を実施している。

これらのビームライン、実験装置の制御系を SPring-8 の協力を得ながら、自力で開発していることは、実験条件の変化等に柔軟に対応出来るものと評価できる(企業であるので、ソフトに対するドキュメンテーションも十分になされているものと推測する)。

一方、当初予定していた XMCD 実験装置やエンジンベンチについては社内ニーズの関係から建設が見送られている。

また、開発されたコンパクト結晶分光器技術は BL28XU や BL36XU にも展開されており、専用ビームラインで開発された技術が当該ビームラインに閉じずに、広く SPring-8 を利用する研究者に活用されるように努力しているという観点で評価できる。

2. 「施設運用及び利用体制」に対する評価

一社専用のビームラインであり、社内の設備としてきちんと位置付けて安全管理され、常駐者も配置されている。当初は立ち上げ期と言うこともあり、それまで放射光を利用していた研究者による利用に

限られていたが、徐々に利用者層が拡大し、現在では約 150 名の利用者に及んでいる。利用者の拡大と共に稼働率も 85% 程度まで上がっている。ビームライン責任者によりこれらの利用者に対して適切にビームタイム配分がなされ、常駐者の指導、支援の下に適切に研究が遂行されている。研究課題における成果専有/成果非専有の数のバランスも適切である。

3. 「研究課題、内容、成果」に対する評価

XAFS 法を利用した排ガス触媒、二次電池、燃料電池関係の課題が約 60% のビームタイムを占め、残りがゴムや樹脂を対象とした X 線小角散乱、X 線回折法を用いた応力解析、S3DXRD をはじめとする技術開発に充てられている。卑金属系排ガス触媒の過渡応答における触媒金属と担体の役割等の研究がなされ、それらは *Angewandte Chemie International Edition* に掲載され、*PCCP (Physical Chemistry Chemical Physics)* 誌の Cover artwork に選出される等優れた成果である。S3DXRD の開発も進み、実証実験の結果が出てき、論文執筆準備中とのことである。二次電池材料の評価においても、長時間ステーションを利用出来るという専用ビームラインの特徴を活かして成果を上げてきている。複合材料の解析においても、理論的解析と X 線回折法を用いた実験的解析をうまく組み合わせて解析精度を上げている。これらの研究結果は技術開発と着実に結びつき、成果を上げていると判断される。

成果非専有課題については、各種学術雑誌に発表されている他、SPring-8 産業利用報告会の中でも報告され、そのプロシーディングスは JASRI より公開技術報告書として認定されている。報告された論文の中には高分子、自動車、電気化学と広い分野で受賞を受けていることは評価できる。一方で特許出願が 1 件というのは SPring-8 を利用した成果を十分に捕捉できていないのではないかと懸念されるので、知的財産を含めた多方面の利用成果の確実な把握をお願いしたい。

4. 「今後の計画」に対する評価

マイクロビーム形成、走査型 3DXRD 顕微鏡の実用化、X 線 CT、ラミノグラフィーの実用化と今後も計画が目白押しであるが、着実に達成することを期待する。

二次元検出器から生み出される大量のデータ管理

や走査型 3DXRD 顕微鏡のデータ処理等が課題として上げられたが、それぞれの専門家の協力も得ながらシステムやデータ処理ソフトの開発を行い、必要に応じて HPCI の活用等も検討されたい。

トヨタグループはあいちシンクロトロン光センターにも専用ビームラインの建設を計画しており、放射光ビームラインを担当できる人材が必要となろう。また増加する利用者が放射光利用研究から正しい解析結果を得て技術開発にフィードバックできる様に、利用者に対する教育や人材育成を行う事が望まれる。

BL33XU の設置やあいちシンクロトロン光センターへの専用ビームライン建設など、放射光を用いた研究成果の事業への効果に関するグループ内における啓蒙活動は進んでいると判断出来る。社会的に大きな影響力を持つ企業グループであることも意識し、SPring-8 利用の有用性を広く社会に対する啓蒙、広報活動にも一層の注力をお願いしたい。

以上

「生体超分子複合体構造解析ビームライン(BL44XU)専用施設中間評価結果」

生体超分子複合体構造解析ビームライン (BL44XU) は、生体内の組織化された機能を理解するために、多様な機構で反応系を制御している生体超分子複合体の立体構造を X 線結晶構造解析法により解明することを目的として、大阪大学蛋白質研究所が建設し、1999 年より運用を行なっている。現在の第二期設置契約期間 (2008 年 8 月～2018 年 8 月) において、上記目的に適した装置の性能向上に取り組んでおり、数多くの論文発表を行い、生体等の機能・機構解明において高い研究成果を創出している。このことなどを鑑み、専用施設審査委員会 (以下本委員会) は第二期後半も当該ビームラインの設置と運用を「継続」することを勧告することが妥当であると判断した。ただし、台湾 NSRRC との協定とビームタイムの利用に関しては、SPring-8 の利用制度の主旨と整合性を保つよう、蛋白質研究所が主体的に実施課題に関与することを検討すべきである。

以下、大阪大学蛋白質研究所から本委員会に提出された「生体超分子複合体構造解析ビームライン中間評価報告書」と平成 25 年 9 月 24 日に開催された委員会での報告および討議に基づき、以下の点に

ついてその評価と提言を記す。

1. 「装置の構成と性能」に対する評価

本ビームラインは、アンジュレーターと SPring-8 標準の二結晶モノクロメータ (DXM) による高輝度な平行ビームに特長があり、さらにエアベアリング式高精度ゴニオ、同軸望遠鏡による微小結晶のマウント、SPACE ロボット機構によるサンプルスクリーニングを搭載することで、結晶格子が大きく、回折強度が弱く、X 線損傷が大きい蛋白質超分子複合体結晶の測定に適した仕様となっている。これらの工夫と財源確保が十分に行われていることは、高く評価できる。

2. 「施設運用及び利用体制」に対する評価

本ビームラインは、大阪大学蛋白質研究所が設置・運営するものであるが、ビームタイムは共同利用にも適切に配分され、共同利用研究所としての使命を果たしている。特に、ビームライン運営経費に関し、多くの競争的資金を含む資金調達に、蛋白質研究所およびビームライン関係者の多大な努力が認められ、高く評価したい。一方、利用に関しては、全体の 25% のビームタイムを台湾シンクロトロン NSRRC にほぼ無条件で配分している運営形態には、疑問が残る。台湾の構造生物学分野における研究レベルは非常に高く、成果の創出にも貢献しているが、本ビームラインにおける研究課題および研究成果に関して設置者側の関与・責任をもっと明確にすべきである。

3. 「研究課題、内容、成果」に対する評価

本ビームラインにおける研究活動のレベルは、極めて高く、難易度の高い超分子複合体や膜蛋白質を中心に、インパクトファクターの高い海外学術誌に多くの論文を発表しており、論文数も最近 2、3 年も増加傾向にある。これまでも、チトクロム酸化酵素の結晶構造解析に成功し、酸素還元に伴うプロトンポンプ機構やプロトン輸送機構の解明、分子量 1000 万の巨大蛋白質核酸複合体であるボルト (vault) 粒子全体の構造解析に成功した。さらに細胞間の連携協調に関与するギャップ結合チャンネル機構コネキシン、核内遺伝子情報の核外輸送機構に係わるエクスポーチン・RNA 複合体の構造決定、繊毛・鞭毛運動などを担う分子モーターであるダイニンの立体構造の解明、光合成中心における酸素発

生の核である金属イオンを含む巨大蛋白質複合体の高分解能原子構造解明など、難易度の高い超分子複合体や膜蛋白質の構造解明に成功し、生体等の機能・機構解明に大きな成果を上げており、その研究成果は高く評価できる。

4. 「今後の計画」に対する評価

生体超分子複合体の構造解析は、今後の構造生物学にとって極めて重要なテーマであり、蛋白質研究所としても重要な研究テーマである。このような難易度の高い目的に特化したビームラインを整備することは、同研究所のみならず、日本の構造生物学の推進にとっても重要な戦略である。SPring-8の数ある構造生物ビームラインの中での位置づけも明確であり、今後もこの方向での展開・成果が期待できる。縦集光系導入による微小結晶の構造解析や、検出器を含めたハードウェアの高度化により、さらなる発展を期待したい。

以上

「東京大学放射光アウトステーション物質科学ビームライン (BL07LSU) 専用施設中間評価結果」

東京大学放射光アウトステーション物質科学ビームライン（以下、本施設という）は、東京大学の専用ビームラインという特性に対応して、共用ビームラインでは実施困難な特徴のある物質科学研究の飛躍的進展を図ることを目的とし、30 m長直線部の長尺アンジュレーターに高分解能分光光学系と精選した測定装置を備えたビームラインとして建設された。本施設の大きな特徴であるアンジュレーター光源の可変偏光性を活かした研究の達成に遅れがあるものの、アンジュレーター光源の高輝度性を活かして得られた研究実績を評価し、専用施設審査委員会（以下本委員会）は本施設の設置と運用の「継続」を勧告することが妥当であると判断した。

以下、東京大学放射光連携研究機構から本委員会に提出された「東京大学放射光アウトステーション物質科学ビームライン中間評価報告書」、平成25年9月24日に開催された本委員会での報告および討議、さらに委員会での「中間報告会質問への回答」と「中間報告書補足資料」に基づき、以下の点についてその評価と提言を記す。

1. 「装置の構成と性能」に対する評価

本施設を構成するアンジュレーター光源は、30 m長直線部に水平および垂直偏光を発生する8の字アンジュレーターを交互に8セグメント配置することにより、偏光面が水平あるいは鉛直の直線偏光だけでなく任意角度の直線偏光、左右円偏光の発生と円偏光度の高速切り替えが可能な仕様となっており、SPring-8初となるだけでなく世界的にも唯一の高輝度・高機能アンジュレーター光源である。高輝度の長尺アンジュレーターとスリットレスの高性能軟X線分光器をあわせた光源の構成は高輝度と高分解能を同時に実現するものとして高く評価できる。一方、現時点で利用可能なアンジュレーターの性能という点では、直線偏光モードは水平偏光または鉛直偏光アンジュレーターセグメントどちらかの単独使用、円偏光モードは左右いずれかに固定での使用となっている。高速円偏光スイッチングの実現と熱負荷によるアンジュレーターギャップ制限の解消に向けたR&Dが進められており、設置計画趣意書に掲げられた光源の性能目標を早期に達成することが強く期待される。

実験ステーションとしては、時間分解軟X線分光実験装置、フリーポート、三次元走査型光電子顕微鏡、超高分解能軟X線発光装置が整備されている。時間分解軟X線分光実験ステーションは蓄積リング光源を用いた時間分解実験装置としては世界最高となる時間分解能50ピコ秒での軟X線光電子分光測定が可能となっている。フリーポートに設置された後置鏡による設計集光スポットサイズは水平50 μm、鉛直10 μmを達成している。三次元走査型光電子顕微鏡ステーションでは高輝度放射光をフレネルゾーンプレートで集光したナノビームによって、高空間分解能の二次元マッピング光電子スペクトルを得ることが可能となっている。さらに、スペクトルの放出角度依存性を利用した深さ方向の分析を加えた三次元空間解析を実現している。ナノビームのスポットサイズは70 nmを達成しており、エネルギー分解能100 meVともに世界最高性能となっている。超高分解能軟X線発光装置では、世界最高となる分解能10,000を達成し、大気圧下の液体試料や動作状態あるいは電位制御した電池での高分解能軟X線発光測定が可能となっている。以上のように、世界最高の性能目標を掲げて建設を進めてきた専用目的の実験ステーションについて、すべて目標を達成し、建設開始から短期間で利用実験を開始したこ

とは高く評価できる。

2. 「施設運用及び利用体制」に対する評価

「中間報告書追加資料」に記載されている「実験課題数」は最大でも13で、この数年は横ばい状態であり、適切な課題数であるか疑問視する意見があった。一方、この「実験課題数」は報告資料の「共同利用実験採択数」と一致しており、同資料記載の「一般課題のビームタイム配分率<30%」や口頭報告での「共同利用は全ビームタイムの40%程度」を合わせ考えると、整備課題やBL独自の研究課題を合わせた全実験課題数は資料の「実験課題数」の倍以上となっているのではないかと疑問もあった。利用者および利用目的を分けた課題数、利用時間数も把握し、運用状況に関する自己評価の精密化を図って欲しい。

共同利用に対する取り組みについては、立ち上げ後の早い時期から審査や成果公開の体制の整備を進め全国共同利用を開始し、最近では共同利用課題の採択率50%という競争的な環境を維持しつつ外部ユーザーの利用が実質的に確保されていることは高く評価できる。また、共同利用が国内にとどまらず、国際共同研究が増加していることも評価できる。

3. 「研究課題、内容、成果」に対する評価

時間分解軟X線分光実験ステーションでは高時間分解能を活かして、半導体表面の光起電力効果における電子状態変化を直接観測し、半導体表面の触媒性能と密接に関係するキャリア輸送過程と表面再結合過程の寿命を分離して測定することに成功した。フリーポートでは、高輝度の微小スポットを活かした微小領域の二次元光電子分光測定が可能となる新しい分析器の開発研究が行われ、微細試料の拡大像の取得や偏光依存二次元光電子分光測定に成功している。三次元走査型光電子顕微鏡ステーションでは世界最高性能を活かして、グラフェン/金属界面の電子状態の直接観測などに成功している。超高分解能軟X線発光装置では、振動準位を分離した水の軟X線励起ラマンを観測することに成功し、世界最高の分解能を持つのみ検出し得る振動エネルギーのわずかな違いから、水素結合のひとつが切断された水分子を選択的に励起していることを示すなどの成果がある。

以上のように、実験ステーションでの研究成果はいずれも長尺アンジュレーターの高輝度性を活かし

た、極めて高い水準となっていることは高く評価できる。一方、本施設の大きな特徴であり、限定的な利用が可能になっている偏光可変性を積極的に活かした研究課題や研究成果は見受けられない。本施設の建設目的と計画目標の達成という観点から、光源から実験装置までを含めた本施設のみが成しえる可変偏光特性を活かした研究課題を早急に推進すべきである。

成果の公開については、中間報告書追加資料の論文リストでは2010年から2013年までの学術雑誌への発表数は15報であり、権威ある学術雑誌への発表もあるものの決して多いとは言えない。特に最近の3年間は横ばい状態となっており、今後の成果公開数の増加が期待される。その他の研究成果公開として、S課題には発表が義務付けられている東京大学での研究会がこれまでに5回開催されていること、学会発表に対する表彰を含めた受賞件数が16件あること、新聞等への発表件数が7件あることは評価できる。

4. 「今後の計画」に対する評価

計画では想定されていなかった問題の発生によるアンジュレーター光源の目標達成の遅れや、計画当初の目標に掲げられていながら具体的な研究展開が見られない生命科学分野など未達成の目標については、達成状況や問題点を客観的に把握したうえで具体的な達成計画の立案が必要であろう。さらに、計画通りに進んでいる部分も含めて設置提案書に掲げた本施設全体としての目標を実現するロードマップを明確にし、本研究機構における実施体制およびリーダーシップを確立していただきたい。

本施設の大きな特徴である高輝度で偏光可変のアンジュレーター光源については、当初目標の高速円偏光スイッチングを早期に実現し、インパクトのあるオリジナルな研究を展開することを期待する。実験ステーションに関する今後の計画として挙げられている、軟X線共鳴磁気光学効果の実験は本施設の特徴である円偏光高速スイッチングが十二分に活かされる課題であり、超高分解能軟X線発光装置の差動排気による大気圧下試料の軟X線発光分光システムの開発は現時点での優位性からさらに国際競争力を高めるものであり、いずれも妥当なものであり、計画通り実現してもらいたい。

以上

SPring-8 コンファレンス 2014 ～最先端光サイエンスの世界～

SPring-8 登録施設利用促進機関の高輝度光科学研究センターは、来る3月7日（金）に大阪において【SPring-8 コンファレンス 2014 ～最先端光サイエンスの世界～】と題したコンファレンスを開催します。

このコンファレンスはSPring-8における先端放射光利用研究の拡大・進化、また、新たな利用研究開拓のために、SPring-8の概要、運転現状、高度化並びに利用成果を発信することを目的とするもので、口頭発表におきましては、施設情報とユーザーによる研究成果が呼応するプログラムを企画しております。

会場併設のポスターでは、SPring-8利用に役立つ施設情報や若手研究者の成果をご紹介します、相談窓口も設置します。

下記の案内をご覧ください、奮ってご参加ください。

記

- 【日 時】平成26年3月7日（金）10:00～18:00
- 【会 場】グランフロント大阪北館4階 ナレッジシアター
(〒530-0011 大阪府大阪市北区大深町3-1)
- 【ア ク セ ス】http://kc-i.jp/data/pdf/theater_map.pdf
- 【プログラム】下記ホームページをご確認ください。
- 【参加方法】事前登録制（参加費無料）
下記ホームページよりお申し込みください。
- 【申込締切】平成26年2月28日（金）17:00

アクセス

グランフロント大阪 北館 4階
ナレッジシアター



会場【ナレッジシアター】アクセス

【ホームページ】

<http://www.spring8.or.jp/ja/science/meetings/2014/140307/>

【問い合わせ先】

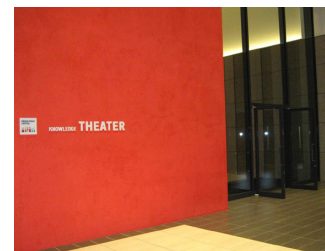
登録施設利用促進機関(公財)高輝度光科学研究センター
SPring-8 コンファレンス事務局 垣口・吉川
E-mail: sp8conf2014jimu@spring8.or.jp
(コンファレンス事務局専用アドレス)



SPring-8 コンファレンス2014ポスター
(詳しくは PDF ファイルをご覧ください。)



前回 SPring-8 コンファレンスの様子



会場【ナレッジシアター】

第22回 SPring-8 施設公開のご案内

理化学研究所と高輝度光科学研究センターは、理研播磨キャンパス内の各研究機関のご協力のもと、本年も「施設公開」を下記のとおり開催いたします。この施設公開は、周辺地域のみなさまに施設とその成果をご覧いただき、研究活動について理解を深めていただくために、科学技術週間にちなんで毎年4月下旬に実施しているものです。

今年も、SPring-8、SACLAをはじめとする播磨キャンパス内の各施設の装置公開や研究成果紹介、科学講演会、光科学に関する実験・実演など、施設をより身近に感じていただけるようなイベントを企画しております。

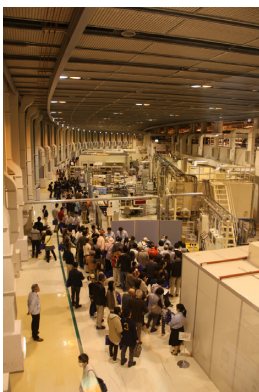
みなさまのご来場をお待ちしております。

記

- ◎日 時：平成26年4月27日（日）
9時30分～16時30分（受付は15時30分まで）
※今回は日曜日です。
- ◎場 所：理化学研究所播磨キャンパス
- ◎内 容：装置・施設の公開、科学講演会、科学実演・工作、研究成果紹介、見学ツアー など
- ◎入場料：無料
- ◎事前予約：不要

※当日は、キャンパス内への車乗り入れはできません。

播磨科学公園都市内の共同駐車場（無料）をご利用ください。
共同駐車場からは無料バスを運行しています。



【問い合わせ先】

第22回 SPring-8 施設公開実行委員会事務局
理化学研究所 放射光科学研究推進室
高輝度光科学研究センター 広報室

TEL：0791-58-0900 FAX：0791-58-0800

E-mail：sp8open2014@riken.jp

URL：http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/events/open_sp814/



第22回施設公開ポスター



前回の施設公開の様子



第14回 SPring-8 夏の学校 開催のご案内 —最先端の放射光科学を学ぶ—

開催日：2014年7月6日（日）～9日（水）(予定)

場所：SPring-8（兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1）

カリキュラム概要：基礎講座／応用講座／ビームライン実習

募集定員：60名程度

参加費：無料（但し宿泊費・交通費等は自己負担）

対象：❖大学院修士（博士前期）課程の学生

（人数に余裕があれば学部4年生も受け入れます）

❖所属大学で放射線業務従事者として教育を受け、登録されていること

❖主催大学の推薦枠あり

参加登録受付期間：4月21日（月）10:00～5月16日（金）17:00まで（予定）

参加登録：WEBでのOn-line登録による参加申し込みとなります。

（応募者多数の場合は参加登録の内容をもとに選考させていただきます。）

詳しくはSPring-8ウェブサイトをご覧ください。

<http://www.spring8.or.jp/ja/> ⇒ 「大学生・院生の方へ」 ⇒ 「夏の学校」 ⇒ 「第14回」

（Webサイトは3月下旬頃にオープン予定）

主催：（公財）高輝度光科学研究センター

（独）理化学研究所

（独）日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門

兵庫県立大学大学院物質理学研究科・生命理学研究科

兵庫県立大学高度産業科学技術研究所

関西学院大学大学院理工学研究科

東京大学放射光連携研究機構

岡山大学

北陸先端科学技術大学院大学

問い合わせ先：SPring-8夏の学校事務局

（公財）高輝度光科学研究センター 研究調整部

TEL：0791-58-0987 FAX：0791-58-0830

e-mail：2014summerschool@spring8.or.jp

SPring-8 利用者情報 編集委員会

委員長	牧田 知子	利用業務部
委員	淡路 晃弘	広報室
	梅谷 啓二	利用研究促進部門
	籠島 靖	SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 編集幹事 (兵庫県立大学)
	梶 義則	安全管理室
	後藤 俊治	XFEL 利用研究推進室
	櫻井 吉晴	利用研究促進部門
	高野 史郎	加速器部門
	田口 哲也	研究調整部
	竹下 邦和	光源・光学系部門
	松下 智裕	制御・情報部門
	三浦 圭子	産業利用推進室
	宮松 誠	利用業務部
	矢橋 牧名	XFEL 研究開発部門 ((独) 理化学研究所 放射光科学総合研究センター)
		(以上、敬称略五十音順)
事務局	小南 篤史	利用業務部
	前川 照夫	利用業務部
	神田 ゆかり	利用業務部

SPring-8 利用者情報

Vol.19 No.1 FEBRUARY 2014

SPring-8 Information

発行日 平成26年(2014年)2月14日

編集 SPring-8 利用者情報編集委員会

発行所 公益財団法人 高輝度光科学研究センター
TEL 0791-58-0961 FAX 0791-58-0965

(禁無断転載)



SACLA

シケイン下流側アンジュレータ、シケイン、シケイン上流側アンジュレータ



公益財団法人 **高輝度光科学研究センター**
Japan Synchrotron Radiation Research Institute

〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1
[広報室] TEL 0791-58-2785 FAX 0791-58-2786
[総務部] TEL 0791-58-0950 FAX 0791-58-0955
[利用業務部] TEL 0791-58-0961 FAX 0791-58-0965
e-mail : sp8jasri@spring8.or.jp
SPring-8 Web Site : <http://www.spring8.or.jp/>